



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

ULB

Grobstruktursimulation turbulenter Mehrphasenströmungen mit und ohne Phasenübergang

Groh, Bernd
(2020)

DOI (TUprints): <https://doi.org/10.25534/tuprints-00011680>
Lizenz: lediglich die vom Gesetz vorgesehenen Nutzungsrechte gemäß UrhG
Publikationstyp: Dissertation
Fachbereich: 16 Fachbereich Maschinenbau
Quelle des Originals: <https://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/11680>

Grobstruktursimulation turbulenter Mehrphasenströmungen mit und ohne Phasenübergang

Vom Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt
zur
Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Bernd Groh

aus Langen

Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. J. Janicka
Mitberichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. P. Stephan
Mitberichterstatter:	Dr. rer. nat. habil. Amsini Sadiki

Tag der Einreichung:	16. August 2004
Tag der mündlichen Prüfung:	26. Oktober 2004

Darmstadt 2004

Groh, Bernd: Grobstruktursimulation turbulenter Mehrphasenströmungen mit und ohne Phasenübergang

Darmstadt, Technische Universität Darmstadt

Jahr der Veröffentlichung der Dissertation in TUpriints: 2020

Verfügbar unter lediglich die vom Gesetz vorgesehenen Nutzungsrechte gemäß UrhG.

Vorwort

Diese Arbeit¹⁾ entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt.

Bei dem Leiter des Fachgebietes, Herrn Professor Dr.-Ing. Johannes Janicka, möchte ich mich herzlich bedanken. Er hat mir die Gelegenheit zur Promotion gegeben und durch seine fortwährende Begleitung das Vorhaben maßgeblich vorangetrieben. Weiterhin danke ich den Herren Professor Dr.-Ing. Peter Stephan und Dr. rer. nat. habil. Amsini Sadiki für die Übernahme des Koreferats.

Bei allen Kollegen und Mitarbeitern des Instituts bedanke ich mich für die gute Zusammenarbeit und das kollegiale Verhältnis. Durch zahlreiche Diskussionen insbesondere mit den Herren Dipl.-Ing. Mouldi Chrigui, M.S. Rajani Kumar Akula, Dr.-Ing. Andreas Kempf, Dipl.-Ing. Bernhard Wegner, Dr.-Ing. Markus Klein und Dr.-Ing. Michael Düsing wurden die Ergebnisse dieser Arbeit erst möglich. Letztgenannten sowie meinem Zimmerkollegen Dipl.-Ing. Andreas Ludwig möchte ich ganz herzlich für das Korrekturlesen meines Manuskripts danken.

¹⁾Diese Arbeit war Gegenstand einer Überprüfung durch die Untersuchungskommission für wissenschaftliches Fehlverhalten an der TU Darmstadt. Dabei wurden externe Gutachter einbezogen. Als Auflage wurde die Richtigstellung und Vervollständigung der Arbeit an folgenden Stellen aufgegeben:

Seite 1, Kapitel 1.1, erster Satz und folgend; erster Absatz, letzter Satz; zweiter Absatz

Seite 3, Kapitel 1.3.1, zweiter Satz und folgend

Seite 4, Kapitel 1.3.2, zweiter Satz und folgend, sowie Seite 5 bis Seite 6

Seite 28, Kapitel 2.1.1, erster Satz und folgende

Seite 29, Kapitel 2.1.2, erster Satz und folgende, wie auch Seite 30 bis 32

Seite 65, Kapitel 3.3.1

Seite 68, Kapitel 3.3.2

Seite 71, Kapitel 4.1.1, zweiter Satz und folgende, wie auch Seite 72 bis 78

Seite 89, Kapitel 4.3.1, zweiter Satz und folgende

Seite 91, Kapitel 4.3.2, erster Satz und folgend

Seite 93, Kapitel 4.3.2.2, erster Satz und folgend, sowie Seite 94

Seite 96, Kapitel 4.4, erster Satz und folgend

Seite 98, Kapitel 4.4.1, erster und zweiter Satz des vierten Absatzes

Der durch die Arbeit erlangte Dokortitel wurde belassen.

Darmstadt, 20. Januar 2016

Ich möchte mich besonders bei meinen Eltern bedanken. Sie haben mich jederzeit in meinem Vorhaben unterstützt und meinen Werdegang ermöglicht.

Besonderer Dank gilt meiner Freundin Silke, die mich während dieser Zeit sehr unterstützte, oftmals motivierte und bisweilen sogar ertragen musste.

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbstständig verfasst und dabei außer den angegebenen Hilfsmitteln keine weiteren verwendet habe. Ich habe bisher noch keinen Promotionsversuch unternommen.

Bernd Groh

Darmstadt, im Sommer 2004

Die Vernunft ist ein Licht. Davon will und soll die Natur erleuchtet, jedoch nicht in Brand gesteckt werden.

Giacomo Leopardi (1798-1837), ital. Dichter

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	XI
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund	1
1.2 Motivation	2
1.3 Stand der Forschung	3
1.3.1 Euler - Euler - Beschreibungsweise	3
1.3.2 Euler - Lagrange - Darstellung	4
1.3.2.1 RANS von Mehrphasenströmungen	7
1.3.2.2 DNS von Mehrphasenströmungen	13
1.3.2.3 LES von Mehrphasenströmungen	18
1.3.3 Hybride Modelle	24
1.4 Zielsetzung	25
1.5 Aufbau der vorliegenden Arbeit	26
2 Theoretische Grundlagen	28
2.1 Charakterisierung von Mehrphasenströmungen	28
2.1.1 Phänomenologische Klassifizierung	28
2.1.2 Allgemeine Zustandsgrößen	29
2.1.3 Verdünnte versus dichte Fluid-Partikel-Strömung	31
2.1.4 Phasenwechselwirkung zwischen fluider und disperser Phase	32
2.2 Turbulente Strömungen	33
2.2.1 Beschreibung des Phänomens Turbulenz	33
2.2.2 Bilanzgleichungen	35
2.2.3 Ansätze zur Modellierung von turbulenten Skalen	38
2.2.3.1 Direkte Numerische Simulation	38
2.2.3.2 Reynoldsmittelung	39
2.2.3.3 Grobstruktursimulation	40
3 Euler'sche Berechnung der Fluidströmung	42
3.1 Elemente der Grobstruktursimulation	42
3.1.1 Filterung	42

3.1.2	Modellierung der vektoriellen Feinstrukturspannungen - Wirbelviskositätsansatz	47
3.1.2.1	Smagorinsky-Modell	47
3.1.2.2	Yoshizawa-Modell	48
3.1.2.3	Dynamische Methoden	49
3.1.3	Modellierung der skalaren Feinstrukturspannungen - Wirbeldiffusitätsansatz	53
3.2	Numerisches Lösungsverfahren	53
3.2.1	Verwendete Koordinatensysteme	54
3.2.2	Räumliche Diskretisierung der Differentialgleichungen	55
3.2.3	Zeitintegration der Transportgleichungen	58
3.2.4	Druckkorrektur	62
3.2.5	Zeitschrittbegrenzung für Mehrphasenströmungen	64
3.3	Statistische Auswertung für die Simulation von Mehrphasenströmungen	65
3.3.1	Bedeutung und Auswahl statistischer Größen	65
3.3.2	Nomenklatur statistischer Größen	68
3.3.3	Kriterien der statistischen Auswertung	68
4	Lagrange'sche Berechnung der dispersen Phase	71
4.1	Modellierung ohne Phasenübergang	71
4.1.1	Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung	71
4.1.2	Lagrange'sche Bewegungsgleichung für das Einzelpartikel bei höheren Reynoldszahlen und kleinem Dichteverhältnis	74
4.2	Modellierung mit Phasenübergang	79
4.2.1	Verdampfung flüssiger Einzeltropfen	79
4.2.2	Bilanzgleichung für Tropfenmasse und -energie	81
4.2.3	Die Filmtheorie am Beispiel des „uniform-temperature“-Modells	82
4.2.3.1	Verdampfungsrate	84
4.2.3.2	Wärmestrom durch die Phasengrenzfläche	85
4.2.4	Tropfengrößenabnahme	87
4.2.5	Verifikation - Verdampfung eines Einzeltropfens in ruhender Umgebung	87
4.3	Phasenwechselwirkung	89
4.3.1	Einfluss der Fluidturbulenz auf die Partikelbewegung	89
4.3.2	Einfluss der dispersen Phase auf die Fluidströmung	91
4.3.2.1	Projektions-Modell	92
4.3.2.2	Einfluss der Partikelbewegung auf die Fluidturbulenz	93
4.4	Numerisches Lösungsverfahren	96
4.4.1	Partikellokalisierung auf dem numerischen Netz und Partikel-Verfolgung	97
4.4.2	Interpolation der Fluid- und Partikelfeldgrößen am Partikelort	100

5	Simulation einer vertikalen, homogenen, isotropen Gitterturbulenz	102
5.1	Beschreibung der Konfiguration	102
5.2	Numerische Abbildung	104
5.2.1	Rand- und Anfangsbedingungen	104
5.2.2	Kriterien zur Bestimmung der Berechnungskonfiguration	107
5.3	Berechnungsergebnisse der Einphasenströmung	108
5.3.1	Geschwindigkeitsfeld der Gasphase	109
5.3.2	Vergleich des Smagorinsky- und des Eingleichungs-Feinstrukturmodells	109
5.4	Berechnungsergebnisse der Mehrphasenströmung	112
5.4.1	Geschwindigkeitsfeld der Trägergasphase	113
5.4.2	Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase	113
5.4.3	Turbulente kinetische Energie der Trägergasphase	114
5.4.4	Energiespektren der Trägergasphase	117
6	Simulation einer verdrahten Strömung	120
6.1	Beschreibung der Konfiguration	120
6.2	Numerische Abbildung	121
6.3	Berechnungsergebnisse	123
6.3.1	Geschwindigkeitsfeld der Trägergasphase	123
6.3.2	Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase	126
6.3.3	Verteilung des Partikeldurchmessers	128
7	Simulation eines verdampfenden Sprühnebels in einer heißen Luftströmung	130
7.1	Beschreibung der Konfiguration	130
7.2	Numerische Abbildung	131
7.3	Berechnungsergebnisse	133
7.3.1	Geschwindigkeitsfeld der Gasphase	133
7.3.2	Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase	135
7.3.3	Verteilung des Tropfendurchmessers	136
8	Zusammenfassung	139
9	Anhang	141
9.1	Stoffkonstanten und als konstant verwendete Eigenschaften	141
9.2	Stoffeigenschaften der Flüssigkeitsphase	142
9.2.1	Dichte	142
9.2.2	Spezifische Wärmekapazität	143
9.3	Stoffeigenschaften beim Phasenübergang - Dampfdruck und spezifische Verdampfungsenthalpie	143
9.4	Stoffeigenschaften der Gasphase	143

9.4.1	Dichte	143
9.4.2	Spezifische Wärmekapazität	144
9.4.3	Thermische Wärmeleitfähigkeit	145
9.4.4	Dynamische Viskosität	146
9.4.5	Binärer Diffusionskoeffizient	147
Literaturverzeichnis		148

Nomenklatur

Lateinische Symbole

Größe	Einheit	Bedeutung
B_M		Massentransfer-Zahl
C		dynamisch bestimmter Parameter
C_{Germ}		dynamisch bestimmter, stabilisierter Parameter
C_k		Parameter im Yoshizawa-Modell
c	J/(kg K)	spezifische Wärmekapazität der Tropfen-Flüssigkeit
c_m		Massenkonzentration
c_p	J/(kg K)	spezifische Wärmekapazität bei konstanten Druck
C_s		Parameter des Smagorinsky-Modells
C^{sgs}		dynamisch bestimmter Parameter im Yoshizawa-Modell
c_{vol}		Volumenkonzentration
C_W		Widerstandsbeiwert
C_ϵ		Parameter im Yoshizawa-Modell
D	m	Durchmesser
D_d	m	Durchmesser eines Partikels / Tropfens
D_{ij}	s ⁻¹	Diffusionsterm in den Navier-Stokes-Gleichungen
\mathcal{D}		Dispersionskoeffizient
\overline{D}_m	m ² /s	Diffusionskoeffizient des Gemisches
E	m ² /s ³	Dissipationsrate auf Testfilterniveau
\vec{F}_A	N	Archimedischer Auftrieb
\vec{F}_G	N	Gravitationskraft
\vec{F}_W	N	Widerstandskraft
f_d	kg/(m ² s)	Massenstromdichte der dispersen Phase
\vec{g}	m/s ²	Gravitationsvektor
H_x, H_y, H_z	m	Größe des Rechengebiets in jeweiliger Koordinatenrichtung
h	J/kg	spezifische Enthalpie
h''	J/kg	spezifische Enthalpie des Dampfes bei Siedetemperatur
h'	J/kg	spezifische Enthalpie der Flüssigkeit bei Siedetemperatur
Δh_v	J/kg	spezifische Verdampfungsenthalpie der Tropfen-Flüssigkeit

Größe	Einheit	Bedeutung
$J_{\alpha j}$	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$	Diffusionsterm des Stoffes α
$J_{h,j}$	kg/s^3	Molekularer Enthalpietransport
J_v	kg/s	Stoffstrom des verdampfenden Stoffes
K_m	m^2/s	D ² -Gesetz-Modellkonstante
k	m^2/s^2	turbulente kinetische Energie
\mathcal{K}		Relaxationsparameter
K_H		Wärmetransfer-Zahl
L	m	charakteristisches Längenmaß
L_{ij}	m^2/s^2	Leonard-Spannungen
M	m	Maschenweite des Turbulenzgenerators
\mathcal{M}	kg/mol	Molekulargewicht
m	kg	Masse der kontinuierlichen Phase
m_d	kg	Masse eines Partikels / Tropfens
\dot{m}_d	kg/s	Massenstrom der dispersen Phase pro Sekunde
\dot{m}_v	kg/s	Verdampfungsrate eines Tropfens
N		Anzahl
N_A		Avogadro-Konstante
N_b	m^{-3}	Partikelanzahldichte
N_d		Partikelanzahl entlang einer Trajektorie
\dot{N}_d	s^{-1}	Partikelanzahl entlang einer Trajektorie pro Zeit
Nu		Nusselt-Zahl
p	N/m^2	Druck
\bar{P}	N/m^2	Druckparameter
Pr		Prandtl-Zahl
Q	N	Quellterme durch Koordinatenkrümmung
\dot{Q}_d	W	Gesamtwärmestrom durch die Phasengrenzfläche
\dot{Q}_s	W	Wärmestrom von der Umgebung auf die Tropfenoberfläche
q	N/kg	Wärmeflussvektor
\bar{R}	$\text{J}/(\text{kmol K})$	Allgemeine Gaskonstante
r	m	zylindrische Koordinate in normaler Richtung
R_m	$\text{J}/(\text{kg K})$	Gaskonstante des Gemisches
R_d	m	Partikel-Ortsvektorkomponente in radialer Richtung
r_d	m	Radius eines Partikels / Tropfens
r_δ	m	Radius der Filmdicke
Re		Reynolds-Zahl
Re_d		Partikel-Reynolds-Zahl
R^E, R^L, R^{ij}		2-Punkt-Korrelationsfunktion
S		Drall-Zahl
Sc		Schmidt-Zahl

Größe	Einheit	Bedeutung
Sh		Sherwood-Zahl
S_h	$\text{kg}/(\text{m s}^3)$	Enthalpiequellterm der dispersen Phase
S_{ij}	s^{-1}	Deformationsgeschwindigkeitstensor
S_k	$\text{kg}/(\text{m s}^3)$	Energiequellterm der dispersen Phase
$S_{k^{\text{sgs}}}$	$\text{kg}/(\text{m s}^3)$	Feinstrukturenergiequellterm der dispersen Phase
S_ρ	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$	Massenquellterm der dispersen Phase
S_{u_i}	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{s}^2)$	Impulsquellterm der dispersen Phase
St		Stokes-Zahl
T	K	Temperatur der kontinuierlichen Phase
T_d	K	Temperatur eines Partikels / Tropfens
t	s	Zeit
T_{ij}	m^2/s^2	Spannungstensor
U_1, U_2, U_3	m/s	charakteristische Fluid-Geschwindigkeitskomponenten
u_1, u_2, u_3	m/s	Fluid-Geschwindigkeitskomponenten
$u_{d,1}, u_{d,2}, u_{d,3}$	m/s	Partikel-Geschwindigkeitskomponenten
u_{fd}	m/s	axiale Sinkgeschwindigkeitskomponente eines Partikels
v''	m^3/kg	spezifisches Volumen des Dampfes bei Siedetemperatur
v'	m^3/kg	spezifisches Volumen der Flüssigkeit bei Siedetemperatur
\vec{V}_d	m	Geschwindigkeitsvektor der dispersen Phase
$\vec{V}_{\text{rel.}}$	m/s	Vektor der Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Fluid
V_d	m^3	Volumen eines Partikels / Tropfens
x	m	kartesische Koordinate in axialer Richtung
y	m	kartesische Koordinate in homogener Richtung
$\vec{\mathcal{X}}_d$	m	Ortsvektor der dispersen Phase
$X_{d,1}, X_{d,2}, X_{d,3}$	m	Partikel-Ortsvektorkomponenten
Y	kg/kg	Massenbruch
z	m	kartesische Koordinate in normaler Richtung
Z, Z_L	-	Massenbeladung

Griechische Symbole

Größe	Einheit	Bedeutung
α_d	m^3/m^3	Volumenanteil der dispersen Phase
α_Δ		Verhältnis der Filterweiten
α_k		Modellparameter
α'		Modellparameter
$\bar{\Delta}$	m	Filterweite

Größe	Einheit	Bedeutung
Δ_k	$\text{kg m}^2/\text{s}^2$	Energieerhöhung
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	m	Diskretisierungsweiten
Δt	s	Zeitschrittweite
δ	m	Filmdicke
δ_{ij}		Kronecker-Symbol
δ_w	m	Wirbeldicke
ϵ	m^2/s^3	Dissipationsrate
η_k	m	Kolmogorov-Länge
κ_x, κ_y	m^{-1}	Wellenzahl
κ_t	s^{-1}	Frequenz
λ	$\text{W}/(\text{m K})$	Wärmeleitfähigkeit
ν	m^2/s	molekulare kinematische Viskosität
$\nu_{\text{eff.}}$	m^2/s	effektive Viskosität
ν_t	m^2/s	turbulente Viskosität
μ	$\text{kg}/(\text{m s})$	molekulare dynamische Viskosität
ϖ	N/m^2	Korrekturdruck
ρ	kg/m^3	Dichte der kontinuierlichen Phase
ρ_d	kg/m^3	Dichte eines Partikels / Tropfens
σ	kg/m^3	Gemischdichte der kontinuierlichen Phase
σ_d	kg/m^3	Gemischdichte der dispersen Phase
τ_d	s	Partikelrelaxationszeit
$\tau_{\text{edd.}}$	s	Wirbellebensdauer
$\tau_{\text{int.}}$	s	Interaktionszeit eines Partikels mit einem turbulenten Wirbel
τ_k	s	Kolmogorov-Zeit
τ_s	s	charakteristisches Zeitmaß
$\tau_{\text{tra.}}$	s	Durchgangszeit eines Partikels durch einen turbulenten Wirbel
Φ_d	rad	Partikel-Ortsvektorkomponente in tangentialer Richtung
φ	m	zylindrische Koordinate in tangentialer Richtung
$\langle \psi \rangle$		Reynolds-Mittel der Größe ψ

Hochgestellte Indizes

Größe	Bedeutung
$\bar{\cdot}$	Tiefpassfilterung
$\overline{\cdot \Delta A}$	Flächenmittelwert
$\overline{\cdot \Delta N}$	Mittelwert über alle Partikel in einem betrachteten Volumen
$\overline{\cdot \Delta V}$	Volumenmittelwert

Größe	Bedeutung
\sim	Filterung
$'$	Abweichung von gefiltertem bzw. Reynolds-gemitteltem Wert
$''$	Abweichung von Favre-gefiltertem bzw. Favre-gemitteltem Wert
$\hat{\cdot}$	Testfilterung
\cdot^*	unkorrigiert
$\vec{\cdot}$	Vektor
E	Euler
gs	Grobstruktur
kart	für kartesische Koordinaten
L	Lagrange
n	Nr. des Zeitschritts
RK	Runge-Kutta
sgs	Feinstruktur
Test	auf Testfilterung bezogen
zyl	für zylindrische Koordinaten

Tiefergestellte Indizes

Größe	Bedeutung
0	Referenzgröße
a	Luft (<i>air</i>)
α	Stoff
b	beliebiges (Volumen)
β	Stoff
boil.	Siedepunkt (<i>boiling</i>)
γ	Durchmessergrößenklasse der dispersen Phase
B	Block (-Profil)
cl	auf den Achswert bezogen
d	Partikel- / Tropfenphase
eff.	effektiv (angepasst)
f	Fluid- / Gasphase
i, j, k	jeweilige Koordinatenrichtung
in	Einlass
coll.	Kollision (<i>collision</i>)
l	Summationsindex
m	über die Filmdicke gemittelt
mom.	momentan
out	Auslass

Größe	Bedeutung
rms	Standardabweichung (<i>root mean square</i>)
ref.	Referenzzustand im Film
rel.	relativ
sat.	Sättigung
s	Tropfenoberfläche (<i>surface</i>)
t	turbulent
v	Dampf (<i>vapor</i>)
\parallel	parallel
\perp	orthogonal
∞	freie Strömung

Abkürzungen

Größe	Bedeutung
BBO	Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrichs-Levy Zahl
DNS	Direkte Numerische Simulation
FFT	Fast-Fourier-Transformation
GAL	Grid-Averaged-Lagrangian Model
LDA	Laser-Doppler-Anemometrie
LEM	Linear Eddy Model
LPP	Lean Premixed Prevaporized
LES	Grobstruktursimulation (<i>Large-Eddy Simulation</i>)
PDA	Phasen-Doppler-Anemometrie
PDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
RANS	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen

Zur Abkürzung der Schreibweise von Formeln wird die Einstein'sche Summenkonvention verwendet, d. h. über stumme Subskripts wird summiert, wenn sie als Produkt in einem Term doppelt auftreten. Beispiel:

$$\frac{\partial u_k}{\partial x_k} := \sum_{k=1}^3 \frac{\partial u_k}{\partial x_k},$$

aber keine Summation bei

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}.$$

1 Einleitung

1.1 Hintergrund

Viele in der Natur [...] ablaufenden Strömungsvorgänge sind durch die Koexistenz zweier oder mehrerer Phasen gekennzeichnet. So finden sich in unserer natürlichen Umwelt Beispiele für derartige Mehrphasenströmungen in Regen, Hagel und Schnee sowie Sand- und Schneestürmen oder in den Begleiterscheinungen des Vulkanismus (Ascheauswurf, pyroklastische Wolken). Weit vielfältiger von ihrem Erscheinungsbild her sind die Mehrphasenströmungen, die in weiten Teilen der Energie- und Verfahrenstechnik, der Umwelttechnik, der Rohstoff gewinnenden Industrie, aber auch in der Lebensmittel- und pharmazeutischen Industrie anzutreffen sind. Diese sogenannten Mehrphasensysteme zeichnen sich durch ein hohes Maß an Komplexität aus, die zusätzlich zu den Strömungsvorgängen von Aggregatzustandsänderungen der beteiligten Phasen, chemischen Reaktionen und thermischen Wechselwirkungen geprägt sein können. Das Erkennen von Gesetzmäßigkeiten in diesen komplexen Systemen bildet die Grundvoraussetzung für ein umfassendes Verständnis und ein gezieltes Beeinflussen bei der Auslegung von innovativen, technischen Applikationen und der Optimierung von Prozessabläufen. [48]

Bis in die heutige Zeit basiert die Entwicklung von technischen Anwendungen zumeist auf experimenteller Erfahrung und der Durchführung von Prüfstands-Messungen. Neue und verbesserte numerische Berechnungsverfahren für Ein- und Mehrphasensysteme und die rasante Entwicklung auf dem Gebiet der elektronischen Datenverarbeitung mit dem damit verbundenen Anstieg an verfügbarer Rechenleistung, haben in den letzten Jahren jedoch dazu geführt, dass die numerische Strömungsmechanik (CFD)¹⁾ nicht nur im Bereich der Wissenschaft, sondern auch in der industriellen Anwendung ein anerkanntes Forschungs- und Entwicklungswerkzeug ist. Dabei wird die Qualität der von der numerischen Simulation bereitgestellten Ergebnisse maßgeblich von der physikalisch-mathematischen Modellierung beeinflusst. Die in das Berechnungsverfahren eingehenden Teilmodelle bestimmen den Grad der detaillierten Berücksichtigung von physikalischen Phänomenen und Wechselwirkungen maßgeblich. Hierbei werden die in die mathematische Modellierung eingehenden physikalischen Phänomene in einem ständigen Wechselspiel zwischen experimenteller Untersuchung und numerischer Validierung von Berechnungsergebnissen anhand dieser Strömungsexperimente stetig weiterentwickelt und deren Zuverlässigkeit verbessert. [48]

¹⁾engl.: Computational Fluid Dynamics

1.2 Motivation

Derzeit werden über 80% des weltweiten Energiebedarfs durch fossile Brennstoffe gedeckt. Der Anteil dieser Brennstoffe wird sich laut dem Abschlussbericht der Weltenergiekonferenz in Buenos Aires 2001 noch erhöhen [13]. Um die bei der Energieumwandlung entstehenden Umweltbelastungen zu reduzieren und die zum Teil auch begrenzten Ressourcen effizient zu nutzen, muss der gesamte Energieumwandlungsprozess aus Primärenergieträgern wie Kohle, Gas und Öl und deren industrielle und private Nutzung optimiert werden. Die Entwicklung neuer Verfahren, beziehungsweise die Optimierung bestehender Systeme setzt jedoch ein detailliertes Verständnis der physikalischen Abläufe voraus.

Im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit stehen turbulente Mehrphasenströmungen, wie sie beispielsweise in Kraftwerks- und Industriefeuerungsanlagen oder in Flugtriebwerken Einsatz finden. Eine in Zukunft verkürzte Entwicklungszeit neuer Brennkammern, beziehungsweise deren Optimierung durch die Verwendung neuer Brennkonzeppte, wie das der mageren Vormischverbrennung mit Vorverdampfung (LPP)²⁾, erfordert heutzutage aufgrund zumeist kostenintensiver und zeitaufwendiger Experimente die numerische Berechnung der in diesen Systemen auftretenden Mehrphasenströmungen. Bei der Wahl des Simulationsverfahrens muss jedoch zwischen Aufwand und Genauigkeit der numerischen Beschreibung abgewogen werden. Angesichts steigender verfügbarer Rechenkapazitäten zum einen, und der in dieser Arbeit behandelten verdünnten Mehrphasenströmungen, die durch einen begrenzten Anteil der dispersen Phase charakterisiert sind, zum anderen, findet im Rahmen dieser Arbeit die Euler-Lagrange'sche Methode Verwendung. Da die Qualität der erhaltenen Berechnungsergebnisse durch die Verwendung physikalisch-mathematischer Teilmodelle und insbesondere durch die numerische Beschreibung der umgebenden Trägergasströmung bestimmt ist, wird letztere mit der Methode der Grobstruktursimulation berechnet. Die potentielle Überlegenheit der Grobstruktursimulation gegenüber statistischen Berechnungsmethoden für kalte Einphasenströmungen ist allgemein anerkannt und soll somit auch auf dem Gebiet der numerischen Berechnung von Mehrphasenströmungen zum Tragen kommen.

Die vorliegende Arbeit soll zum grundlegenden Verständnis der komplexen physikalischen Phänomene und der auftretenden Interaktionen zwischen den Phasen turbulenter Mehrphasenströmungen beitragen. Um die Einordnung dieser Arbeit in den aktuellen wissenschaftlichen Kontext zu erleichtern, wird zunächst ein Überblick über den Stand der Forschung gegeben; hierbei werden bereits einige Begriffe und Zusammenhänge verwendet, die erst im Lauf der Arbeit definiert beziehungsweise behandelt werden. Wenn im Folgenden von Fluid, Fluidströmung, fluiden Phase oder Trägergasphase gesprochen wird, ist im Allgemeinen, wenn nicht ausdrücklich erwähnt, immer ein Gas (hier: Luft) gemeint.

²⁾engl.: Lean Premixed Prevaporized

1.3 Stand der Forschung

Für die numerische Berechnung von turbulenten Mehrphasenströmungen wurden in der Vergangenheit im Wesentlichen zwei Verfahren entwickelt, namentlich die Euler-Euler-Beschreibungsweise und die Euler-Lagrange-Darstellung. Um einen Einstieg in die Thematik der vorliegenden Arbeit zu geben, werden diese Verfahren in den folgenden Abschnitten zunächst in ihren Grundlagen und Eigenschaften erläutert und anschließend eine zusammenfassende Darstellung der damit erzielten Ergebnisse gegeben.

1.3.1 Euler - Euler - Beschreibungsweise

Die Euler-Euler-Beschreibungsweise stellt eine Möglichkeit zur mathematischen Beschreibung disperser Mehrphasenströmungen dar. Grundlegend für das Euler-Euler-Modell ist die Annahme, dass sich die beiden in einem beliebigen Kontrollvolumen δV_b (siehe Abb. 2.1) anzutreffenden Phasen als kontinuierliche Phasen beschreiben lassen, die sich gegenseitig durchdringen und miteinander in Wechselwirkung stehen [48]. Die Individualität der Partikel der eigentlich diskontinuierlichen, dispersen Phase findet im Rahmen dieser Modellvorstellung keine Berücksichtigung (Kontinuumsannahme). Um die Kontinuumsannahme für die disperse Phase zu rechtfertigen, müssen bestimmte Voraussetzungen gegeben sein (nach [48]):

- Der Volumenanteil der dispersen Phase α_d (Gl. (2.1)) muss für jedes betrachtete Kontrollvolumen δV_b hinreichend groß sein. Dies bedeutet, dass der mittlere Partikelabstand deutlich geringer sein muss, als der Abstand des der numerischen Simulation zugrunde liegenden Gitternetzes, da sonst nicht gewährleistet ist, dass sich eine für eine Kontinuumsbetrachtung ausreichend repräsentative Anzahl von Partikeln in einem betrachteten Kontrollvolumen befindet.
- Für die Herleitung der Bilanzgleichungen ist es erforderlich, dass die für ein Kontinuum charakteristischen konvektiven und diffusiven Transport- und Austauschprozesse innerhalb einer Phase gegeben sind [48]. Dies trifft für die kontinuierliche Phase bei einem nicht zu hohen Volumenanteil der dispersen Phase sicherlich zu, auf der anderen Seite bedarf es hinsichtlich der dispersen Phase einer gewissen Mindestkonzentration und eine weitgehende Durchmischung beider Phasen.

In der Literatur finden sich erste Ansätze für die mathematische Beschreibung dieser Methode bei Drew [34], der in seiner Arbeit Volumen-gemittelte Grundgleichungen für Zweiphasenmedien beschrieb. Elghobashi & Abou-Arab [40] entwickelten Transportgleichungen für die Massenerhaltung und den Impulstransfer basierend auf den Vorstellungen von Soo [183], die für die folgenden Anwender dieser Methode grundlegend geworden sind. Weiter voranschreitende Entwicklungen dieser Methode sind mit Elghobashi [41], der eine Partikel-Schmidt-Zahl, basierend auf empirischen Korrelationen einführt, und mit Picart [137], der zur Beschreibung der Verteilung von Partikeln einen Dispersions-Tensor basierend auf Tchen's Theorie [198] unter

der Annahme einer Zwei-Parameter-Familie für Lagrange'sche Korrelations-Funktionen propagierte, verbunden. Chung et al. [19] haben zur Beschreibung der Impulstransportgleichung der dispersen Phase die Wirbelviskosität der dispersen Phase in Relation zur Wirbelviskosität des Trägergases gesetzt, indem sie eine Funktion, abhängig vom Verhältnis der Partikelrelaxationszeit zu einem turbulenten Zeitmaß, einführten. Weitere Arbeiten betrachteten das Problem der numerischen Abbildung von physikalischen Effekten, bei denen die Einzelpartikelstruktur eine signifikante Rolle spielt (beispielsweise Partikel-Wand-Wechselwirkungen). Die verschiedenen Ansätze von Chung et al. [19], Rizk & Elghobashi [151] und Ding et al. [33] für die Randbehandlung der dispersen Phase zeigen deutlich, dass es nur unter entsprechendem Modellierungsaufwand gelingt, die Auswirkungen der Partikeldispersion auf das Strömungsverhalten adäquat zu berücksichtigen. Eine weitere Einschränkung, neben der Problematik geeignete Randbedingungen für die disperse Phase zu definieren, besteht darin, einen charakteristischen Partikeldurchmesser, der räumlich und zeitlich konstant ist, einheitlich festzulegen. Durch die Aufsplittung der dispersen Phase auf eine gegebene Anzahl von Partikelgrößenklassen und eine separate Behandlung von zu formulierenden Transport- und Erhaltungsgleichungen mit einem Satz von dazugehörigen Zustandsgrößen, lässt sich diese Beschränkung aufheben. Jedoch ist der numerische Mehraufwand enorm hoch, da für jede Partikelgrößenklasse mindestens vier weitere partielle Differentialgleichungen anzusetzen sind.

Prinzipiell hat die Anwendung der Euler-Euler-Methode für die numerische Simulation von Mehrphasenströmungen den Vorteil, dass die Transportgleichungen für die kontinuierliche und die disperse Phase vom gleichen Typ sind und somit mit den gleichen Algorithmen und Lösungsverfahren behandelt werden können. Insofern ist dieser Modellierungsansatz in der Anwendung im Fall einer monodispersen Verteilung der Partikelphase vergleichsweise weniger rechenzeintensiv. Für den Fall einer polydispersen Partikelverteilung besteht dieser Vorteil nicht. Mit der Verwendung der Grobstruktursimulation zur Beschreibung der Trägergasphase ist weiterhin die Erwartung verbunden, auch die diskontinuierliche, disperse Phase qualitativ sehr gut beschreiben zu können, so dass hierfür im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine im nächsten Abschnitt vorgestellte Methode verwendet wird.

1.3.2 Euler - Lagrange - Darstellung

Eine weitere Möglichkeit der numerischen Beschreibung von Mehrphasenströmungen stellt das Euler-Lagrange-Modell dar. Das Euler-Lagrange-Modell geht grundsätzlich von der Annahme aus, dass die einzelnen Phasenbestandteile entsprechend ihrer physikalischen Eigenschaften modelliert werden [48]. So erfolgt die Modellbildung und mathematische Beschreibung der kontinuierlichen Phase auf der Grundlage der Kontinuumsvorstellung und führt zu den in Abschnitt 2.2.2 dargestellten Grundgleichungen der Strömungsmechanik.

Die disperse Phase wird im Euler-Lagrange-Modell als eine Menge [...] individueller Einzelpartikel betrachtet, die sich unter dem Einfluss der auf sie wirkenden Kräfte und Momente im Strömungsfeld der kontinuierlichen, fluiden Phase bewegen [48]. Dabei bestimmt sich die Position und die Geschwindigkeit aus einer Integration der Partikel-Bewegungsgleichung, welche

traditionell als BBO³⁾-Gleichung bezeichnet wird; für den Fall einer Phasenänderung der dispersen Phase muss zusätzlich der Partikeldurchmesser und die -temperatur betrachtet werden. Aus der Summe der einzelnen Partikelbewegungen ergeben sich die makroskopischen Strömungsgrößen der dispersen Phase, wie beispielsweise die lokale Partikelkonzentration, die mittlere Partikelgeschwindigkeit oder der auf ein bestimmtes Kontrollvolumen bezogene summarische Impulsaustausch zwischen der kontinuierlichen und der dispersen Phase.

Um den mit diesem Modellansatz einhergehenden Berechnungsaufwand auf ein für heutige Verhältnisse erträgliches Maß zu beschränken, sind für das Euler-Lagrange-Modell bestimmte Annahmen zu treffen:⁴⁾

- In den meisten aus der Literatur bekannten Arbeiten und auch im Rahmen dieser Arbeit wird in den Transport- und Erhaltungsgleichungen der kontinuierlichen Phase die Verringerung des Volumens durch den Volumenanteil der dispersen Phase vernachlässigt. Die Anwesenheit der dispersen Phase findet in Form von Quelltermen auf der rechten Seite der Euler'schen Transportgleichungen Berücksichtigung. Damit nehmen die Bilanzgleichungen bis auf die Quellterme die Form der Gleichungen der reinen Fluid- beziehungsweise Einphasenströmung an (vgl. Kapitel 2.2.2). Bei globalen und auch lokal auftretenden hohen Partikelkonzentrationen kann dies zu einer unzulässigen Vereinfachung führen.
- Die Aufstellung der (Lagrange'schen) Bewegungsgleichung für das Einzelpartikel erfolgt in der Abstraktion des bewegten Massenpunktes. Die für die Bewegung des Partikels in der Fluidströmung maßgebenden Parameter der Partikelumströmung, wie die Lage des Partikels im Raum, die Anströmung des Partikels, eine eventuell auftretende Strömungsablösung, oder der turbulente oder gegebenenfalls laminare Nachlauf eines Partikels gehen dabei in einer integralen, verallgemeinerten [...] Form in die Modellierung der aerodynamischen Kräfte und Momente in die Bewegungsgleichung des Partikels ein. Daraus ergibt sich, dass beispielsweise der Einfluss der von der idealen Symmetrie einer Kugel abweichenden Partikelform und die damit verbundenen Veränderungen der aerodynamischen Kräfte (Partikelwiderstand und -auftrieb) gegenüber der Fluidströmung einer gesonderten Behandlung bedürfen, die jedoch im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt werden.
- In aller Regel ist es für disperse Mehrphasenströmungen auch mit nur sehr geringen Massenbelastungen der dispersen Phase nicht möglich, die Trajektorie eines jeden individuellen realen Partikels zu berechnen. Um den Berechnungsaufwand zu begrenzen, fasst man eine bestimmte Anzahl physikalischer (realer) Partikel mit denselben Eigenschaften zu sogenannten Partikelpaketen⁵⁾ zusammen. In der numerischen Simulation erfolgt deren Repräsentation zum Erhalt der Massenbilanz der dispersen Phase über die Zuordnung eines Repräsentationsfaktors $N_{d,l}$ (Gl. (4.80)) zu jedem berechneten numerischen Partikel l . Jedoch hat diese Möglichkeit der Reduzierung des numerischen Aufwands ihre

³⁾ Benannt nach A. B. Basset [6], M. J. Boussinesq [11] und C. W. Oseen [132, 133]

⁴⁾ nach [48, S. 32-34]

⁵⁾ engl.: parcels

Beschränkungen. So ergeben sich die makroskopischen Strömungsgrößen der dispersen Phase aus einer räumlichen Mittelung der Zustandsgrößen individuell berechneter Einzelpartikel über das Volumen einer Gitterzelle des der Simulation zugrunde liegenden Gitternetzes. Um die statistische Aussagekraft und Zuverlässigkeit dieser räumlich gemittelten Strömungsgrößen nicht zu beeinträchtigen, muss gewährleistet sein, dass nach Möglichkeit für jedes Kontrollvolumen des numerischen Gitternetzes diese Mittelung über eine repräsentative Anzahl von (numerischen) Einzelpartikeln erfolgt.

- Einige der im Euler-Lagrange-Modell verwendeten Ansätze für die auf das Einzelpartikel wirkenden aerodynamischen Kräfte gelten streng genommen nur für den Fall einer ungestörten [...] Anströmung eines Einzelpartikels in einem unendlich ausgedehnten Fluid ohne Strömungsberandung. In realen dispersen Mehrphasenströmungen wird jedoch die Umströmung des Einzelpartikels durch die Wechselwirkung mit benachbarten Partikeln und deren Wechselwirkung mit dem umgebenden Fluid gestört. Mit zunehmender Partikelkonzentration und damit abnehmenden mittleren Partikelabstand verlieren somit einige dieser Ansätze für die mathematische Formulierung der aerodynamischen Kräfte ihre Gültigkeit. Da das Euler-Lagrange-Modell zunächst von der Betrachtung eines isolierten Einzelpartikels ausgeht, werden mit zunehmender Partikelkonzentration die Grenzen in der Anwendbarkeit des Modells beim Übergang von der verdünnten zur dichten Mehrphasenströmung erreicht.

Ungeachtet dieser einschränkenden Annahmen bietet das Euler-Lagrange-Modell einige wesentliche Vorteile für die numerische Untersuchung von Mehrphasenströmungen, insbesondere für verdünnte Gas-Feststoff und Gas-Tropfen-Strömungen. So ist die numerische Abbildung und adäquate Modellierung von mikroskopischen Prozessen wie Partikel-Wand-Interaktion, Partikel-Partikel-Stoß, Partikel-Agglomeration, sekundärem Zerfall und von Phasenwechselwirkungsprozessen, die an der Phasengrenzfläche ablaufen (Verdampfung, Kondensation, Wärmeübertragung, chemische Reaktionen) besonders vorteilhaft und gegenüber dem Euler-Euler-Ansatz vergleichsweise einfach zu beschreiben [48]. Aufgrund dessen und um die im Allgemeinen bekannten Vorteile der Grobstruktursimulation gegenüber den statistischen Methoden zur Beschreibung von turbulenten Strömungen weiterhin zu nutzen, wird für die Beschreibung der dispersen Phase die Lagrange'sche Darstellung verwendet. Der vergleichsweise geringere numerische Aufwand und eine dabei qualitativ gute Beschreibung spielt hierbei eine umso größere Rolle, da Grobstruktursimulationen technischer Strömungen heutzutage häufig noch Wochen in Anspruch nehmen.

Um eine Einordnung der im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Modelle zu ermöglichen, werden in den folgenden Abschnitten 1.3.2.1 - 1.3.2.3 die verschiedenen Modellansätze zur Beschreibung der Partikeldispersion, Turbulenzmodulation und der Tropfenverdampfung in Bezug auf den Modellierungsgrad der umgebenden Trägergasströmung dargestellt und die Entwicklungen, wie sie in der Literatur bis heute beschrieben werden, zusammengefasst.

1.3.2.1 RANS von Mehrphasenströmungen

Modellierung der Partikeldispersion

Für die Beschreibung der Partikelbewegung unter dem Einfluss der Turbulenz sind verschiedene Modelle vorgeschlagen worden. Eines der ersten Modelle, das die Turbulenzeigenschaften des Fluids entlang der Teilchenbahn berücksichtigte, ist jenes von Yuu et al. [225]. Yuu propagierte, dass ein Partikel in einem „energetragenden“ Wirbel ⁶⁾ für die Dauer seiner Lebenszeit verweilt und danach in einem weiteren Wirbel eintaucht. Als lokale Fluidgeschwindigkeit wurde die Summe aus der lokalen, zeitgemittelten Geschwindigkeit und einer Fluktuationgeschwindigkeit, welche aus einer Gauß-Verteilung mit Hilfe einer Zufallszahl ausgewählt wurde, verwendet. Die Breite der Gauß-Verteilung war durch die Standardabweichung der Geschwindigkeit gegeben, welche sich aus der turbulenten kinetischen Energie unter Annahme isotroper Turbulenz bestimmte.

Ein Nachteil dieser und verwandter Methoden (Lockwood et al. [104], Smith et al. [174]) war jedoch die Nicht-Berücksichtigung des sogenannten „crossing-trajectory“-Effekts⁷⁾. Die Arbeit von Gosman & Ioannides [60] führte dies bezüglich zu einer wesentlichen Verbesserung, da ihr stochastisches Modell eine Relativgeschwindigkeit zwischen einem lokalen Wirbel und einem Partikel erlaubte. Ein Partikel kann einen Wirbel durchwandern, bevor er abgeklungen ist. Die Zeit $\tau_{\text{int.}}$, in der ein Partikel mit einem Wirbel in Wechselwirkung steht, bestimmt sich aus dem Minimum der Wirbellebensdauer $\tau_{\text{edd.}}$ und der Zeit, die das Teilchen benötigt, um den Wirbel zu durchqueren $\tau_{\text{tra.}}$:

$$\tau_{\text{int.}} = \min(\tau_{\text{edd.}}, \tau_{\text{tra.}}) \quad (1.1)$$

Die Wirbellebensdauer $\tau_{\text{edd.}}$ schätzten Gosman & Ioannides im Rahmen eines Zweigleichungsturbulenzmodells aus der turbulenten kinetischen Energie k und dem integralen Längenmaß L , welches gleichfalls aus der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate ϵ gewonnen werden kann, ab:

$$\tau_{\text{edd.}} = \frac{L}{\sqrt{2k/3}} \quad (1.2)$$

Die Zeit $\tau_{\text{tra.}}$, welche das Teilchen benötigt, um den Wirbel zu durchqueren, ermittelten sie aus einer linearisierten Form der Partikel-Bewegungsgleichung:

$$\tau_{\text{tra.}} = -\tau_d \ln \left[1 - \frac{L}{\tau_d |\vec{v}_{\text{rel.}}|} \right] \quad (1.3)$$

Hierbei stellt τ_d die Partikelrelaxationszeit und $|\vec{v}_{\text{rel.}}|$ die Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Fluid dar.

⁶⁾engl.: eddy

⁷⁾Der „crossing-trajectory“-Effekt beschreibt die aufgrund der Relativgeschwindigkeit zwischen einem betrachteten lokalen Wirbel und einem Partikel innerhalb dieses Wirbels auftretende verringerte Dispersion, infolge dessen es zu einer verringerten Aufenthaltszeit des Partikels in diesem Wirbel kommt.

Das Verfahren von Gosman & Ioannides, wie auch ähnliche Verfahren von Shuen et al. [168], haben sich als einfache und effiziente Modelle zur Simulation der Partikeldispersion erwiesen. Jedoch weisen sie einige Nachteile auf:

- Es werden keine räumlichen und zeitlichen Korrelation der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuation der Fluidphase entlang der Partikelbahn berücksichtigt.
- Die Anisotropie der Turbulenz wird nicht berücksichtigt.
- Es werden keine Korrelation zwischen den Geschwindigkeitskomponenten der Fluidgeschwindigkeit berücksichtigt.

Durch die Trägheit eines Partikels entlang seiner Bahn und durch die einwirkenden äußeren Kräfte bewegt sich das Partikel relativ zu einem Fluidelement, wodurch sich auch die Fluktuationen, die ein Fluidelement und ein Partikel während eines numerischen Zeitschrittes Δt erfahren, unterscheiden. Die zeitliche Korrelation der auf das Fluidelement wirkenden Geschwindigkeitsfluktuation u'_1 kann bei zwei aufeinanderwirkenden Zeitschritten durch den Lagrange'schen Zeitkorrelationskoeffizienten $R^L(\Delta t)$ beschrieben werden:

$$R^L(\Delta t) = \frac{\overline{u'_1(t) u'_1(t + \Delta t)}}{\sqrt{\overline{u'^2_1(t)}} \sqrt{\overline{u'^2_1(t + \Delta t)}}} \quad (1.4)$$

Nach Hinze [70] kann mit

$$R^L(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_L}\right) \quad (1.5)$$

eine einfache Approximation des Lagrange'schen Zeitkorrelationskoeffizienten gegeben werden. Dabei stellt T_L das Lagrange'sche, integrale Zeitmaß der Turbulenz dar. Mit Hilfe dieser Korrelationsfunktion zur Beschreibung der Charakteristik der Fluidfluktuationen innerhalb eines durchwanderten Wirbels wurden weitere Modelle vorgeschlagen. So führten Ormancey & Martinon [131] im Rahmen ihrer Arbeit eine Zerfallswahrscheinlichkeit der turbulenten Wirbel ein. Sobald eine gleichverteilte Zufallszahl kleiner wird als das Verhältnis $(\Delta t / T_L)$ ist, wird eine neue, auf das Partikel wirkende Fluktuationsgeschwindigkeit aus einer Gauß-Verteilung durch einen weiteren Zufallsprozess bestimmt. Den „crossing-trajectory“-Effekt beschrieben die Autoren durch die simultane Verfolgung eines Fluidelements und eines Partikels. Die Fluktuationen der Fluidgeschwindigkeitskomponenten am Ort des Partikels wurden mit denen am Ort des Fluidelements mit Hilfe einer Zweipunktkorrelationsfunktion (Euler'sche Raumkorrelation) beschrieben,

$$R^E(|\Delta \vec{r}|) = \exp\left(\frac{-|\Delta \vec{r}|}{(m^2 + 1)L}\right) \cos\left(\frac{m |\Delta \vec{r}|}{(m^2 + 1)L}\right). \quad (1.6)$$

Dabei bezeichnete $|\Delta \vec{r}|$ den Betrag des Abstandsvektors zwischen Fluidelement und Partikel. Der Parameter m beschrieb die Anzahl der Nulldurchgänge in der Korrelationsfunktion.

Eine weitere Möglichkeit, die Dispersion von Partikeln in turbulenten Strömungen zu beschreiben, basiert auf der Langevin-Gleichung, welche auch zur Beschreibung der Brown'schen Molekularbewegung verwendet wird. Dieses Verfahren soll im Folgenden näher beschrieben werden, da insbesondere die zum Vergleich mit eigenen Ergebnissen herangezogenen Resultate aus RANS-Simulationen mit diesem Verfahren erhalten wurden.

Verfahren dieser Art werden häufig zur Simulation der Schadstoffausbreitung in der Atmosphäre verwendet und als „random-walk“-Methoden bezeichnet (Hall [65], Ried [149]). Die zeitliche Änderung der Geschwindigkeit eines Tracer-Partikels in homogener Turbulenz ergibt sich aus der Langevin-Gleichung zu

$$du_1(t) = -\frac{u_1}{T_L}dt + \sigma_{u_1}\sqrt{\frac{2}{T_L}}\xi(l), \quad (1.7)$$

wobei der erste Term auf der rechten Seite einen zeitlich korrelierten Anteil und der zweite Term einen stochastischen Anteil darstellt. σ_{u_1} ist die Varianz der Geschwindigkeitsverteilung und $\xi(l)$ stellt einen stochastischen Prozess mit weißem Rauschen, einem Mittelwert von Null und einer Varianz von dt dar. Die diskretisierte Form der Langevin-Gleichung beschreibt eine Markov-Sequenz (Taylor [197]) und führt zu folgender Gleichung für eine homogene Turbulenz

$$u_1^{n+1} = R^L(\Delta t)u_1^n + \sigma_{u_1}\sqrt{1 - (R^L(\Delta t))^2}\xi^n, \quad (1.8)$$

wobei das Superskript n den Zeitschritt kennzeichnet und ξ^n eine Gauß-verteilte Zufallszahl mit einem Mittelwert von Null und einer Varianz von Eins darstellt. Durch obige Gleichung wird deutlich, dass eine Markov-Sequenz einen stochastischen Vorgang beschreibt, wobei u_1^{n+1} nur von u_1^n abhängt und nicht von früheren Ereignissen beeinflusst wird.

Erweiterungen dieses Verfahrens zur Berechnung der Dispersion von Partikeln in inhomogener Turbulenz zur Berücksichtigung einer Partikel-Drift von Gebieten höherer Turbulenz in Gebiete geringerer Turbulenz wurden von Legg & Raupach [96] vorgeschlagen. Die Korrektur dieser mittleren Drift wurde mit der Wirkung eines mittleren Druckgradienten verknüpft. Die entsprechenden Korrekturterme wurden aus den jeweiligen Impulsgleichungen für die Hauptströmungsrichtung und die vertikale Komponente bestimmt. Bei der Betrachtung von ebenen Strömungen führte dies zu:

$$u_1^{n+1} = R_{u_1}^L(\Delta t)u_1^n + \sigma_{u_1}\sqrt{1 - (R_{u_1}^L(\Delta t))^2}\zeta^n + (1 - R_{u_1}^L(\Delta t))T_{L,u_1}\frac{\partial \overline{u_1^L u_2^L}}{\partial y} \quad (1.9)$$

$$u_2^{n+1} = R_{u_2}^L(\Delta t)u_2^n + \sigma_{u_2}\sqrt{1 - (R_{u_2}^L(\Delta t))^2}\xi^n + (1 - R_{u_2}^L(\Delta t))T_{L,u_2}\frac{\partial \overline{\sigma_{u_2}^2}}{\partial y} \quad (1.10)$$

Zur Berücksichtigung der Korrelation zwischen den Geschwindigkeitskomponenten u_1^n und u_2^n

wurden Zufallszahlen in der Weise bestimmt, dass gilt (Legg [95]):

$$\xi^n = b\zeta^n + \sqrt{1 - b^2}\chi^n \quad (1.11)$$

$$b = \frac{\overline{u'_1 u'_2} (1 - R_{u_1}^L(\Delta t) R_{u_2}^L(\Delta t))}{\sigma_{u_1} \sigma_{u_2} \sqrt{1 - (R_{u_1}^L(\Delta t))^2} \sqrt{1 - (R_{u_2}^L(\Delta t))^2}} \quad (1.12)$$

Dabei sind ζ^n und χ^n unabhängige Zufallszahlen, die aus einer Gauß-Verteilung mit der Varianz Eins und einem Mittelwert von Null bestimmt wurden.

Für die Berechnung der Dispersion von „schweren“ Partikeln wurde das zuvor beschriebene Verfahren erweitert und die Relativbewegung des Partikels gegenüber dem Fluidelement berücksichtigt. Dies bedeutet, dass der Autokorrelationskoeffizient entlang der Partikelbahn betrachtet wurde. Dies führt unter Einwirkung der Schwerkraft zu einer Abnahme der Korrelation zwischen den Fluidfluktuationen entlang der Partikelbahn. In einigen Arbeiten, wie der von Pozorski et al. [142], wurde dies durch die Einführung eines modifizierten Korrelationszeitmaßes T_L^* berücksichtigt. Dieses Zeitmaß ist kleiner als das integrale Lagrange'sche Zeitmaß und wird meist nach Csanady [28] berechnet

$$R^{L*}(\Delta t) = \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_L^*}\right), \quad (1.13)$$

$$T_L^* = \frac{T_L}{\sqrt{1 + \left(\beta \frac{|\vec{y}_{\text{rel.}}|}{\sigma_{u_2}}\right)^2}}. \quad (1.14)$$

β stellt das Verhältnis vom integralen Lagrange'schen zum integralen Euler'schen Zeitmaß dar und kann in guter Näherung zu etwa Eins angenommen werden.

Resümee

Die Komplexität der Dispersionsmodellierung gründet sich im Rahmen von RANS-Simulationen im wesentlichen darauf, dass für die Strömungs- und Skalarfeldkomponenten nur statistisch gemittelte Werte bestimmt werden, welche gerade auch in Strömungen mit komplexen Berandungsgeometrien, in denen beispielweise auch Krümmungseffekte eine wichtige Rolle spielen, nicht in jedem Fall mit den real (momentan) vorliegenden Beiträgen übereinstimmen. Die Qualität der numerischen Trägergasphasenbeschreibung kann somit vielfach unzureichend sein, so dass infolge die Vorhersage der Partikeldispersion verfälscht oder ungenau wird. Demgegenüber beschreibt eine LES ein gefiltertes Strömungs- und Skalarfeld, was der real vorliegenden Strömung gemeinhin weitaus näher kommt. Für die LES ist damit die Erwartung verbunden, eine qualitativ gute numerische Beschreibung der Dispersion zu erhalten, da die Verteilung der Partikelphase insbesondere durch die von der Simulation aufgelösten Turbulenzwirbel bestimmt ist (vgl. Kap. 1.3.2.3). In Folge dessen wird für die Beschreibung der Partikeldispersion im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine andere, in Kapitel 4.3.1 dargestellte Strategie verfolgt.

Beschreibung der Turbulenzmodulation

Neben der Beschreibung der Dispersion von Partikeln ist die Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase im Rahmen der numerischen Berechnung des Turbulenzfeldes der Trägergasphase eine wesentliche Voraussetzung für eine qualitativ genaue Beschreibung der Phänomene und Wechselwirkungen in Mehrphasenströmungen. Der Grad der Turbulenzintensität beeinflusst die Dispersion der Partikelphase, die effektive Viskosität der Fluidphase und die Fluid-Partikel-Transferkoeffizienten (Widerstand, Wärme- und Stoffübertragung).

In der Folge der Entwicklungen auf dem Gebiet der Turbulenzmodulation von Gas-Feststoff-Strömungen haben Gore & Crowe [58] experimentelle Arbeiten zusammengefasst und anhand des Verhältnisses des Partikeldurchmessers zu integralem, fluiden Längenmaß D_d/L eine Unterteilung der Turbulenzmodulation gegeben. Demnach verringern Partikel mit einem Verhältnis $D_d/L < 0,1$ den Turbulenzgrad der Trägergasströmung, während Partikel mit einem Verhältnis $D_d/L > 0,1$ ihn verstärken.

Eine weitergehende Einteilung der Effekte der dispersen Phase hinsichtlich der Wirkung auf die Fluidturbulenz gibt Elghobashi [39]. Mit der Partikelrelaxationszeit $\tau_d = 18\mu / (\rho_d D_d^2)$ bestimmt er das Verhältnis zweier turbulenter Zeitskalen τ_d / τ_{edd} und trägt dieses über der Volumenbeladung α_d der dispersen Phase auf. Für Volumenbeladungen $\alpha_d < 10^{-6}$ ist der Einfluss der dispersen Phase auf die Fluidphase zu vernachlässigen. Im Bereich $10^{-6} < \alpha_d < 10^{-3}$ tritt nach Elghobashi eine Turbulenzverstärkung für $\tau_d / \tau_{edd} \geq 1$ auf, während Turbulenzabschwächung für $\tau_d / \tau_{edd} < 1$ beobachtet wird. Für Volumenbeladungen $\alpha_d > 10^{-3}$ werden Partikel-Partikel-Interaktionen dominierend. Elghobashi spricht dann von einer Vier-Wege-Kopplung (vgl. Kapitel 2.1.4).

Um diese Effekte (Turbulenzabschwächung und -verstärkung) in der numerischen Modellierung ganzheitlich zu beschreiben, wurden im Laufe der Entwicklungen verschiedene Ansätze verfolgt, von denen einige im Folgenden beschrieben werden. Eine detailliertere Übersicht über die in der Literatur vorgestellten Turbulenzmodulationsmodelle geben Crowe [23] und Stojanovic [192].

Eine der ersten Formulierungen stammt von Chen & Wood [16]. Sie definierten einen Term, der pro Zellvolumen als zusätzliche Kraft auf das Trägergasfluid wirkt,

$$S_{u_i} = \langle \rho_d \rangle \frac{u_{d,i} - u_i}{\tau_d}, \quad (1.15)$$

wobei $u_{d,i}$ die Partikelgeschwindigkeitskomponente, u_i die Fluidgeschwindigkeitskomponente, ρ_d die Dichte der dispersen Phase und $\langle \cdot \rangle$ eine Volumenmittelung darstellten.

Shuen et al. [169] erweiterten den Euler-Lagrange'schen Ansatz durch die Berücksichtigung eines Partikelquellterms S_k in der Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie im Rahmen eines Zweigleichungs-Turbulenzmodells. Sie definierten zunächst einen Term S_{u_i} , der den Impulsaustausch zwischen fluider und disperser Phase in der jeweiligen Koordinatenrichtung beschreibt

$$S_{u_i} = \frac{1}{V_{i,j,k}} \sum_{l=1}^N \dot{N}_{d,l} m_{d,l} [u_{d,i,l,in} - u_{d,i,l,out}], \quad (1.16)$$

wobei sich die Summation auf alle Partikel bezieht, welche in ein betrachtetes Kontrollvolumen eintreten (Subskript in) und dieses verlassen (Subskript out). $V_{i,j,k}$ bezeichnet das Kontrollvolumen, $\dot{N}_{d,l}$ beschreibt die Anzahl der Partikel entlang einer berechneten Trajektorie in der Aufenthaltszeit und $m_{d,l}$ die Masse eines individuellen, numerischen Partikels l . Den Partikelquellterm identifizierten Shuen et al. mit

$$S_k = \langle u_i S_{u_i} \rangle - \langle u_i \rangle \langle S_{u_i} \rangle. \quad (1.17)$$

Diese Formulierung führt im Allgemeinen zu einem negativen Beitrag des Quellterms (Energiedissipation) und kann daher Phänomene, die gemeinhin die Turbulenz im Fluidfeld erhöhen, nicht beschreiben. Zusätzlich ist Gl. (1.16) in ihrer Formulierung nicht allgemein gültig, da sie den integralen Impulsaustausch nicht repräsentiert (Durst et al. [35]). Einen in dieser Hinsicht verbesserten Ansatz, ist von Yuan & Michaelides [223] vorgestellt worden. Ihre Idee beinhaltet die Vorstellung, dass eine Turbulenzabschwächung durch die dämpfende Bewegung der Partikelphase zustande kommt, während eine Turbulenzverstärkung durch ein Ablösen der Strömung im Nachlauf vergleichsweise „großer“ Partikel entsteht. Die Energieerhöhung Δ_k , bezogen auf ein betrachtetes Kontrollvolumen, geben Yuan & Michaelides an zu

$$\Delta_k \approx D_d^2 \rho f(l_w) [U^2 - u_d^2], \quad (1.18)$$

wobei $f(l_w)$ eine Funktion der Nachlaufänge und D_d der Partikeldurchmesser ist. Yuan & Michaelides berichten von einer guten Übereinstimmung ihres Modells mit experimentellen Daten.

Resümee

In der vorliegenden Arbeit soll der als richtig zu bewertende Gedanke von Yuan & Michaelides aufgegriffen und angewendet werden. Dafür werden im Rahmen der Euler-Lagrange'schen Beschreibungsweise Partikelquellterme formuliert, die nicht nur das Phänomen der Turbulenzabschwächung beschreiben, sondern auch die induzierte Turbulenzverstärkung aufgrund der beschriebenen Nachlaufausbildung wiedergeben (siehe Kapitel 4.3.2).

Modellierung von Verdampfungsprozessen

Betrachtet man Mehrphasenströmungen, bei denen die disperse Phase einen Phasenübergang erfahren kann und somit ihren Aggregatzustand ändert, so muss dies im Rahmen der mathematischen Modellbeschreibung berücksichtigt werden. Wir konzentrieren uns im Rahmen dieser Arbeit auf Gas-Tropfen-Strömungen und die hierbei auftretenden physikalischen Phänomene der Tropfenverdampfung. In der Literatur existieren eine Reihe von Verdampfungsmodellen, die in der Hauptsache für die Einzeltropfenverdampfung entwickelt wurden und sich in zwei Kategorien einteilen lassen. Modelle der ersten Kategorie zeichnen sich durch die Annahme sphärischer Symmetrie der Tropfen und der Grenzschichten aus. Dazu zählen die Ranz-Marshall-Beziehungen (Ranz & Marshall [143]), ein Modell, welches durch eine unendlich hohe Wärmeleitfähigkeit der Tropfenflüssigkeit gekennzeichnet ist ⁸⁾ (Law [91]), der dazu entgegengesetzte

⁸⁾engl.: infinite conductivity model

Fall des nur diffusionskontrollierten Wärmetransports⁹⁾ (Law & Sirignano [93]), sowie ein Modell, das durch eine effektive Wärmeleitfähigkeit bestimmt wird (Abramzon & Sirignano [1]). Die Modelle der zweiten Kategorie werden als achsensymmetrische Modelle bezeichnet. Dabei wird die Annahme zugrunde gelegt, dass die Kernströmung im Innern des Tropfens für den stationären Fall achsensymmetrisch ist. Dazu gehört das Modell von Tong & Sirignano [199]. Die aus den einzelnen Modellen resultierenden Verdampfungsraten \dot{m}_v , sowie Ausdrücke für den Wärmestrom durch die Phasengrenzfläche \dot{Q}_d , werden an dieser Stelle nicht detailliert wiedergegeben. Sie können den Übersichtartikeln von Law [92] und Sirignano [172] entnommen werden. Zur Einschätzung des im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Verdampfungsmodells soll hier kurz auf das einfachste Verdampfungsmodell, dem sogenannten D^2 -Gesetz eingegangen werden (Spalding [185]). Hierbei wird ebenfalls eine sphärische Symmetrie der Tropfen angenommen. Der Verdampfungsprozess berücksichtigt nur konstante Stoffwerte und setzt eine zeitlich und räumlich konstante Tropfentemperatur voraus. Somit wird der Aufwärmvorgang des Tropfens nicht erfasst. Bei vielen experimentellen Untersuchungen ist unter diesen Randbedingungen die Verdampfungsrate proportional zum Tropfendurchmesser, so dass die zeitliche Abnahme der Tropfenoberfläche konstant ist.

$$\frac{d(D_d^2)}{dt} = -K_m = -\frac{4\dot{m}_v}{\pi D_d \rho_d} \quad (1.19)$$

Damit ergibt sich die Verdampfungsrate \dot{m}_v in diesem Fall zu:

$$\dot{m}_v = \frac{\pi}{4} D_d \rho_d K_m \quad (1.20)$$

Durch den linearen Zusammenhang in Gl. (1.20) ist die Bestimmung der Tropfendurchmesserabnahme in vielen Anwendungsfällen unzureichend, so dass im Rahmen der vorliegenden Arbeit eine Modellierung basierend auf der Annahme einer unendlich hohen Wärmeleitfähigkeit verwendet wird. Diese Modellierung stellt einen guten Kompromiss zwischen numerischen Aufwand und erzielbarer Ergebnisse dar (siehe Kapitel 4.2).

1.3.2.2 DNS von Mehrphasenströmungen

Der Begriff der DNS wird auf dem Gebiet der Mehrphasenströmungen für verschiedene, numerische Verfahren verwendet, die sich hinsichtlich Detailliertheit und Genauigkeit in der Modellierung der Partikelbewegung und der Wechselwirkung mit der Fluidströmung stark unterscheiden. Im Folgenden sollen die Entwicklungen für Modelle, die Partikel mit räumlicher Ausdehnung assoziieren, nicht betrachtet werden. Dazu gehören auch Arbeiten, deren Ziel es ist, die vollständige Auflösung der Fluidbewegung in der Umgebung der betrachteten Partikel und Tropfen, sowie ihre etwaige Deformation, ihre Wechselwirkung untereinander (MAC-, CIP-, VOF-Methode, Front-Tracking-Verfahren) zu beschreiben (siehe hierfür [48]).

⁹⁾engl.: conduction limit model

Die meisten Versuche, eine DNS zur Berechnung von Mehrphasenströmungen zu nutzen, basieren auf einer Kombination einer DNS für die Fluidströmung mit einem Lagrange-Modell für die disperse Phase. Die Partikel werden, wie auch im Rahmen dieser Arbeit, als volumenlose Massepunkte betrachtet, d. h. die Details der Partikelumströmung (turbulente Strömungsablösung, turbulenter Nachlauf hinter einem Partikel) werden vernachlässigt und es wird im Rahmen der Lagrange'schen Beschreibung vorausgesetzt, dass die Partikelgröße viel kleiner ist als das kleinste turbulente Längenmaß, die Kolmogorovlänge η_k . In den ersten DNS-Berechnungen wurde des Weiteren zumeist eine Ein-Wege-Kopplung angenommen, da man primär an einer Bestimmung der turbulenten Partikeldispersion und dem Vergleich mit Experimenten für stark verdünnte Fluid-Partikel-Strömungen interessiert war. Im weiteren Verlauf der Lagrange'schen Modellentwicklung wurde die DNS von Gas-Feststoff-Strömungen auch gezielt dazu eingesetzt, die turbulente Wechselwirkung der Partikel mit der Fluidturbulenz zu untersuchen und Modellparameter für vereinfachte Turbulenzmodelle aus den DNS-Berechnungen zu bestimmen. Bei diesen Untersuchungen wurden die berechneten Partikel als punktförmige Kraftwirkungen auf die fluide Phase simuliert. Beispiele derartiger DNS für Gas-Partikel-Strömungen finden sich bei Elghobashi & Truesdell [42, 43, 200], Squires & Eaton [188, 189, 190, 191] und Sundaram & Collins [193, 194, 195]. Die bei diesen Arbeiten untersuchten Strömungen waren Kanalströmungen. Dabei wurde das Partikelverhalten in isotroper Turbulenz untersucht. Die numerischen Gitternetze hatten Auflösungen von $32 \times 32 \times 32$ bis $128 \times 64 \times 128$ Gitterzellen. Die Anzahl der berechneten Partikeltrajektorien schwankte von lediglich 8000 bis zu 10^6 Partikel.

Da die Wechselwirkungen der dispersen und der fluiden Phase Kern dieser Arbeit sind, wird im Folgenden auf die Arbeiten von Squires & Eaton [188], Elghobashi & Truesdell [42, 43] und Boivin et al. [9] etwas näher eingegangen.

Squires & Eaton untersuchten anhand einer stationären, isotropen Turbulenz die Modifikation der turbulenten Fluidströmung aufgrund der Anwesenheit der dispersen Phase. Die Stationarität realisierten sie dabei durch einen konstanten Energiebeitrag, der den größten Turbulenzelementen zugeschrieben wurde. Es wurden Partikel-Stokeszahlen, gebildet mit der Partikelrelaxationszeit und der Wirbellebensdauer der energietragenden Turbulenzelemente, im Bereich von $St = \tau_d / \tau_{edd.} = 0,4$ bis $1,5$ ausgewählt, wobei die Beladung zwischen $Z = \dot{m}_d / \dot{m} = 0,1$ bis $1,0$ variierte. Ziel der Untersuchungen war es, den Einfluss der dispersen Phase auf die turbulente kinetische Energie, die Dissipationsrate und die Konzentrationsverteilung zu ermitteln. Dazu wurden 10^6 Partikel in das Strömungsfeld eingebracht. Als Ergebnis ihrer Studie stellten Squires & Eaton fest, dass die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate bei zunehmender Beladung reduziert wurde (bis zu 50 % bei einer Beladung von 1,0 im Vergleich zur Einphasenströmung). Diese Reduzierung war für kleinere Partikelrelaxationszeiten τ_d größer. Der Blick auf die Energiespektren machte deutlich, dass sich mit zunehmender Massenbeladung die Energieverteilung im hohen Wellenzahlenbereich relativ zur Energie im niedrigen Wellenzahlbereich erhöhte. Diese Erscheinung war bei leichteren Partikeln ausgeprägter. Da die dreidimensionalen Dissipationsspektren ähnliche Ergebnisse lieferten, kamen Squires & Eaton zu dem Schluss, dass der Partikeleinfluss auf die turbulente Strömung zu einer ungleichmäßigen Energieverteilung zwischen kleineren und großen Turbulenzelementen führt.

Das Ziel der Untersuchungen von Elghobashi & Truesdell [42, 43] lag in der Ermittlung des Einflusses der Partikel auf den Transport der turbulenten kinetischen Energie durch den Wellenzahlenraum für eine abklingende, isotrope Turbulenz. Als Parameter wurden die Partikelrelaxationszeit, der Partikeldurchmesser, der Volumenanteil der dispersen Phase und der Einfluss der Gravitation gewählt. Während bei Squires & Eaton in der Partikelbewegungsgleichung nur die Widerstandskraft berücksichtigt wurde, lösten Elghobashi & Truesdell die komplette Partikelbewegungsgleichung (vgl. Kap. 4.1.1), wobei jedoch beide Arbeitsgruppen die Bedingung $D_d/\eta_k \ll 1$ erfüllten, so dass ein direkter Einfluss der Partikel auf die großen Turbulenzelemente ausgeschlossen wurde. Das zeitabhängige Verhalten der turbulenten kinetischen Energie $k(t)$ und der Dissipationsrate $\varepsilon(t)$ in Abhängigkeit der Partikelrelaxationszeit τ_d offenbarte eine Reduzierung der turbulenten kinetischen Energie und eine Erhöhung der Dissipationsrate für steigende Werte τ_d . Die turbulente kinetische Energie $k(t)$ war dabei durch

$$k(t) = \int_0^{\infty} E(\kappa, t) d\kappa \quad (1.21)$$

und die Dissipationsrate $\varepsilon(t)$ durch

$$\varepsilon(t) = 2\nu \int_0^{\infty} D(\kappa, t) d\kappa \quad (1.22)$$

definiert, wobei $E(\kappa, t)$ und $D(\kappa, t)$ die dreidimensionalen Energie- und Dissipationsspektren darstellen und κ die Wellenzahl darstellten. Auf die Frage, ob die für $k(t)$ und $\varepsilon(t)$ festgestellte Tendenz auch für $E(\kappa, t)$ und $D(\kappa, t)$ zutraf, ergab sich, dass unterhalb einer kritischen dimensionslosen Wellenzahl κ_{krit} sowohl das Energie- als auch das Dissipationsspektrum mit zunehmenden τ_d reduziert wurde, während jene oberhalb dieses Wertes erhöht wurden. Somit bewirkten die Partikel eher eine selektive Umverteilung als eine gleichmäßige Reduzierung oder Erhöhung des gesamten Spektrums.

Boivin et al. [9] haben die Turbulenzmodulation aufgrund der Anwesenheit der Partikelphase in einer isotropen Turbulenz untersucht. Für ihre DNS verwendeten sie 96^3 Gitterpunkte und 96^3 Partikel. Dabei vernachlässigten Boivin et al. den Einfluss der Schwerkraft, und die Partikelbewegung wurde durch den Strömungswiderstand bestimmt. Boivin et al. berichten in ihrer Arbeit von einer Reduzierung der turbulenten kinetischen Energie mit zunehmender Beladungsdichte. Die Reduzierung der turbulenten kinetischen Energie ist hierbei relativ unabhängig von der Partikelrelaxationszeit. Die viskose Dissipation fällt relativ zur erhöhten Beladungsdichte und ist größer für Partikel mit kleineren Partikelrelaxationszeiten. Die Betrachtung von Energiedichtespektren zeigte eine auch von Groh et al. [64] und von Elghobashi & Truesdell [43] beobachtete Erhöhung der Energie im hohen Wellenzahlenbereich. Boivin et al. führten diese Erhöhung auf einen Transfer von Fluid-Partikel-Kovarianzen durch die Fluidturbulenz zurück.

Resümee

Die vorangegangene Betrachtung dreier Arbeiten auf dem Gebiet der numerischen Beschreibung des Phänomens der Turbulenzmodulation verdeutlicht insbesondere die Komplexität des Einflusses der dispersen Phase auf die Trägergasphase. Die Bedeutung dessen führt dazu, dass im Rahmen der vorliegenden Arbeit dieser Einfluss genauer untersucht werden soll und im Weiteren eine mathematische Modellierung vorgestellt wird, die in der Lage ist, die beobachteten Phänomene der Turbulenzverstärkung und -abschwächung zu beschreiben vermag.

Modellierung von Verdampfungsprozessen

Aufgrund des im Rahmen einer DNS enormen speicher- und rechenzeitintensiven Aufwands zur Beschreibung von Tropfenverdampfungsphänomenen sind nur wenige Arbeiten auf Basis des Euler-Lagrange'schen Ansatzes bekannt. Der zusätzliche Aufwand ergibt sich einerseits durch die Notwendigkeit, zumindest die inkompressible Form der Euler'schen Transportgleichungen mit variabler Dichte zu lösen, und andererseits, durch die Lösung der Lagrange'schen Transportgleichungen zur Beschreibung der Tropfenposition und -geschwindigkeit, sowie der zusätzlichen Lösung der Tropfendurchmesser- und der Tropfentemperaturgleichung. Dabei werden im Allgemeinen die im vorigen Kapitel 1.3.2.1 beschriebenen Verdampfungsmodelle auf Basis einer angenommenen unendlich großen Wärmeleitfähigkeit der Tropfenphase und einer analytisch betrachteten Stokesumströmung der Tropfen in Kombination mit empirischen Korrelationen, die finite Tropfen-Reynoldszahl-Effekte berücksichtigen, verwendet. Die Widerstandskraft, der Wärmetransfer und die Verdampfungsrate werden in Abhängigkeit zum lokalen Massenbruch des verdampfenden Mediums und in Abhängigkeit zur lokalen Relativgeschwindigkeit und -temperatur zwischen fluider und disperser Phase am Ort des Tropfens ausgewertet. Die im vorigen Abschnitt 1.3.2.2 beschriebenen Untersuchungen zur Partikeldispersion und Turbulenzmodulation sind gleichfalls im Rahmen der Tropfenverdampfung gültig und erschweren die Beschreibung der ablaufenden physikalischen Prozesse zusätzlich. Turbulenzmodulationseffekte werden neben der den Impulsaustausch beherrschenden Widerstandskraft durch den Austausch von Masse und der Wärmeenergie zwischen flüssiger und gasförmiger Phase bestimmt. Die Verdampfungsrate hängt von den lokalen Strömungsbedingungen ab, so dass die Partikelrelaxationszeit eine Funktion von Zeit und Raum ist (Mashayek et al. [111]).

Um eine Einordnung der Möglichkeiten der numerischen Beschreibung dieser genannten Phänomene zu geben, verglichen Miller et al. [121] in ihrer Arbeit acht verschiedene Verdampfungsmodelle auf Lagrange'scher Basis im Hinblick ihre Anwendbarkeit und Effizienz im Rahmen einer DNS. Dabei wurden Gleichgewichts- und Nichtgleichgewichts-Verdampfungsmodelle berücksichtigt und anhand von Einzeltropfen-Verdampfungsfallstudien bewertet. In Bereichen mit vergleichsweise niedriger Verdampfungsrate zeigten alle Modelle eine ähnlich gute Vorhersagefähigkeit, während für Fallstudien mit hohen Verdampfungsraten, in denen die Trägergastemperatur größer als die Siedetemperatur der Tropfenflüssigkeit war, substantielle Unterschiede der Verdampfungsmodelle festgestellt wurden. Der Vergleich von unterschiedlichen Strategien zur Bestimmung der Stoffwerte zeigte, dass die Annahme von konstanten Werten der Wärmekapazitäten im Fall ihrer Studien gerechtfertigt war. In der Zusammenfassung ihrer Ar-

beit wiesen Miller et al. darauf hin, dass Nichtgleichgewichtseffekte für Start-Tropfengrößen $D_{d,0} < 50 \cdot 10^{-6} \text{m}$ bei der Bestimmung der Verdampfungsrate nicht zu vernachlässigen sind.

Mashayek et al. [111] untersuchten anhand einer isotropen, inkompressiblen Turbulenz das Verdampfungsverhalten von Flüssigkeitstropfen. Dabei verwendeten sie zur Beschreibung des Verdampfungsprozesses das einfache D^2 -Gesetz (Gl. (1.20)) sowie eine Ein-Wege-Kopplung zwischen den Phasen. Kern ihrer Arbeit war die Beschreibung des Einflusses der Partikelrelaxationszeit, der Verdampfungsrate und der Tropfen-Schmidt-Zahl im Hinblick auf die Aufstellung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF¹⁰⁾) zur Beschreibung der Tropfengrößenverteilung. Zentrales Ergebnis ihrer Arbeit war, dass sich auch für eine monodisperse Startverteilung der Tropfengröße nach einiger Zeit eine Gauß-verteilte PDF einstellte. In den nachfolgenden Arbeiten [109, 110], in denen verdampfende Tropfen in einer isotropen Turbulenz und einer homogenen Scherströmung simuliert wurden, wurde die verwendete Ein-Wege-Kopplung durch eine Zwei-Wege-Kopplung ersetzt. Die Wärmekapazitäten der Tropfenflüssigkeit und des Dampfes nahmen Mashayek et al. als gleich an. Der Verdampfungsprozess wurde mit einem einfachen „Massen-Analogie“-Modell beschrieben. Insgesamt wurden $5,5 \cdot 10^5$ Tropfen für die Statistik der dispersen Phase verwendet. Anhand des Massenbeladungsverhältnisses, der Tropfenrelaxationszeit und weiteren thermodynamischen Parametern befanden Mashayek et al., dass die Verdampfung frühzeitig aufgrund der verdampften Masse in der Trägergasphase gestoppt und somit eine Sättigung eintreten kann.

In der Arbeit von Miller & Bellan [119] wurde eine Mischungsschicht mit Hydrokarbon-Tropfen untersucht. Im Rahmen einer Euler-Lagrange'schen Formulierung verwendeten Miller & Bellan ein Nichtgleichgewichts-Verdampfungsmodell, das sich auf die Formulierung von Langmuir-Knudsen gründet. Die innere Temperatur der Tropfen wurde als einheitlich angenommen und im Rahmen der Quelltermformulierung eine volle Zwei-Wege-Kopplung zur Beschreibung des Impuls-, Massen- und Wärmeaustausches zwischen den Phasen realisiert. Für die Statistik der dispersen Phase wurden $7,3 \cdot 10^5$ Tropfen verfolgt. Inhalt dieser Studie war die Untersuchung der Dampfsättigung in einer Mehrphasenströmung, die Verteilung der Tropfen sowie die Turbulenzmodulation. Als Ergebnis ihrer Studie fanden Miller & Bellan, dass schon für geringe Gastemperaturen eine Sättigung der Tropfenverdampfung aufgrund der Bildung von Dampf in der Trägergasphase und der Kühlung der Gastemperatur, die sich aufgrund der vorherrschenden, latenten Verdampfungswärme einstellte, eintrat. Dabei war dieser Sättigungszustand mehr von der Starttemperatur der Gasphase als von der Tropfenbeladung abhängig. Demnach verhielt sich die Mischungsschicht ähnlich einer Gas-Feststoff-Strömung mit nicht weiter verdampfenden Tropfen. In Regionen mit höheren Gastemperaturen und niedrigeren Verdampfungsraten wurde der Verdampfungsprozess weiter fortgesetzt. Für die gewählten Start-Tropfendurchmessergrößen berichten Miller & Bellan von einer Verringerung der turbulenten kinetischen Energie.

In einer weiteren Studie zur Untersuchung des Verdampfungsprozesses in einer Mischungsschicht haben Miller & Bellan [120] den Einfluss des Feinstrukturanteils im LES-Kontext an-

¹⁰⁾engl.: Probability Density Function

hand einer a priori Feinstrukturanalyse durch eine Filterung von DNS-Daten untersucht. Sie kamen zu dem Schluss, dass die Vernachlässigung des Feinstrukturanteils im Rahmen einer LES-Simulation zu einem signifikanten Fehler in der Vorhersage der Tropfenwiderstandskraft für Stokeszahlen $St = \tau_d u_{d,in} / \delta_w \approx 1$ führen kann (τ_d bezeichnete hier die Tropfenrelaxationszeit, $u_{d,in}$ die Startgeschwindigkeit der Tropfen und δ_w stellte die Wirbeldicke dar). Zudem bewirkte die Vernachlässigung des Feinstrukturanteils des Dampfmassenbruchs und der Temperatur eine nicht korrekte Vorhersage der Verdampfungsrate und des Wärmestroms durch die Phasengrenzfläche. Im Hinblick auf die Beschreibung der Partikeldispersion im LES-Kontext berücksichtigten Miller & Bellan den vektoriellen Feinstrukturanteil im Rahmen eines vereinfachten Wirbel-Interaktions-Modells auf der Grundlage von RANS-Modellierungsansätzen. Die Feinstrukturvarianzen der vektoriellen und der skalaren Größen schätzten sie dabei mit einem „scale-similarity“-Ansatz ab.

Resümee

Für die numerische Beschreibung von Verdampfungsprozessen, welche im Rahmen der vorliegenden Arbeit betrachtet werden, ist insbesondere die zuletzt beschriebene Studie von Miller & Bellan von Bedeutung. Die Qualität der numerischen Beschreibung des Austausches von Masse und Wärmeenergie zwischen flüssiger und gasförmiger Phase beeinflusst insbesondere die numerische Vorhersage des Tropfendurchmessers und der Tropfentemperatur, sowie die Vorhersage der Turbulenzmodulation in einem Mehrphasensystem. Dabei ist es wichtig, alle turbulenten Zeit- und Längenskalen zu berücksichtigen. Für die im Rahmen einer LES-Simulation zu modellierenden Feinstrukturanteile der vektoriellen und skalaren Feldgrößen gilt dies im Besonderen. In dieser Arbeit wird ein erster Schritt in diese Richtung durch die Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase im Rahmen der Feinstrukturmodellierung für die vektoriellen Feldgrößen gegangen.

1.3.2.3 LES von Mehrphasenströmungen

Die Methode der LES in Verbindung mit einem Lagrange'schen Partikelverfolgungsverfahren ist heutzutage aufgrund des enormen numerischen Aufwands bisweilen noch vielfach in einem akademischen Umfeld zu finden. Die Aktivitäten, welche auf diesem Forschungsgebiet an Hochschulen und Universitäten unternommen wurden und werden, zielen unter anderem darauf ab, mathematische (Teil-) Modelle zur Beschreibung von beobachteten, physikalischen Phänomenen zu entwickeln und diese anhand von Simulationen turbulenter Mehrphasensysteme im Vergleich mit experimentellen Messungen zu validieren, so dass diese in Zukunft Eingang in die Industrie finden. Diese Vorgehensweise begründet sich mit der im Allgemeinen anerkannten Überlegenheit der LES gegenüber Methoden der statistischen Turbulenzmodellierung, gerade auch bei der Vorhersage technischer Strömungen. Im industriellen Umfeld liegt demgegenüber der Schwerpunkt aufgrund vergleichsweise geringerer Rechenzeiten deutlich bei der Anwendung von RANS-Methoden. Hier ist die CFD-Simulation vielfach ein „Tagesgeschäft“, mit dem Ziel, Machbarkeitsaussagen zu erhalten. Die vorliegende Arbeit ist in diesem Rahmen zu sehen,

in dem anhand von Simulationen technisch relevanter Strömungen Aussagen über die Qualität verwendeter mathematische Modelle (Dispersion, Turbulenzmodulation, usw.) getroffen werden, die die Qualität von RANS-Simulationen positiv beeinflussen und verbessern sollen.

Die meisten aus der Literatur bekannten Anwendungen einer LES zur Berechnung von dispersen Mehrphasenströmungen beruhen auf der Verwendung des von der LES berechneten, dreidimensionalen und zeitabhängigen Fluidströmungsfeldes und der Berechnung der Partikelbewegung mittels eines Lagrange'schen Ansatzes. Hierbei wurde in den ersten Arbeiten häufig eine Ein-Wege-Kopplung vorausgesetzt. Im Rahmen dessen untersuchten Wang & Squires [210] eine Partikel-beladene Kanalströmung. Simulationen wurden für Reynoldszahlen Re_τ von 180 und 644 (Re_τ basierend auf der Wandschubspannungsgeschwindigkeit und der halben Kanalbreite) durchgeführt. Die Partikel-Bewegungsgleichung enthielt den Einfluss der Widerstandskraft und der Gravitation. Verschiedene Partikeldurchmesser von 7 bis $70 \cdot 10^{-6}$ m und verschiedene Materialdichten (Lycopodium, Glas und Kupfer) wurden simuliert und gute Übereinstimmungen mit Experimenten (Kulick et al. [87]) und DNS-Simulationen (Rouson & Eaton [155]) erzielt. Statistische Auswertungen der Feldgrößen der dispersen Phase zeigten, dass die LES das bekannte, anisotrope Verhalten der Geschwindigkeitsfluktuationen der Partikelphase mit steigenden Partikelrelaxationszeiten gut wiedergibt.

Eine weitere Anwendung der LES zur Verfolgung von Feststoffpartikeln findet sich in einer Reihe von Arbeiten bei Simonin et al. [31, 32, 170, 171, 211]. Simonin et al. haben LES-Simulationen turbulenter Zweiphasenströmungen verschiedener Konfigurationen zur Validierung eines Euler-Euler-Modells auf der Basis von RANS-Modellierungsansätzen durchgeführt. Der Schwerpunkt der Arbeiten lag auf der Beschreibung der Partikeldispersion im Rahmen des Euler-Euler-Ansatzes beruhend auf der Formulierung eines kinetischen Spannungstensors der Partikelphase sowie von Fluid-Partikel-Kovarianzen und dem Vergleich der entwickelten Modellansätze mit LES-basierten Ergebnissen. Im Rahmen der Validierung der LES für den Fall einer homogenen Turbulenz verglichen Simonin et al. [31] ihre Ergebnisse mit der Theorie von Tchen [198] und den Untersuchungen von Csanady [28], der Tchen's Postulierung, ein Partikel ist permanent in ein und demselben Fluidelement (-Wirbel) getragen, um die bald als richtig erkannte Beobachtung und Berücksichtigung des „crossing-trajectory“-Effekts erweiterte und folgende Koeffizienten zur Beschreibung der Partikeldispersion formulierte:

$$\frac{\mathcal{D}_{d\parallel}(t)}{\mathcal{D}_{\parallel}(t)} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2 u_{fd}^2}{u'^2}}} \quad (1.23)$$

$$\frac{\mathcal{D}_{d\perp}(t)}{\mathcal{D}_{\perp}(t)} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4\beta^2 u_{fd}^2}{u'^2}}} \quad (1.24)$$

$u_{fd} = |\vec{g}| \tau_d$ stellt hierbei die Sinkgeschwindigkeit eines Partikels in einer ruhenden Umgebung dar, $\mathcal{D}_{\parallel}(t)$ und $\mathcal{D}_{\perp}(t)$ bezeichnen die Dispersionskoeffizienten eines Fluidelementes in paralleler

und orthogonaler Richtung zum Gravitationsvektor \vec{g} und u'^2 ist die Varianz der Fluidgeschwindigkeit. $\beta = u'T_L/L$ setzt das Euler'sche integrale Längenmaß L mit dem Lagrange'schen integralen Zeitmaß T_L in Beziehung. Für $u_{fd} \gg u'$ ergibt sich $\mathcal{D}_{d\parallel}(t) = 2\mathcal{D}_{d\perp}(t)$. Simonin et al. fanden für große Partikel-Fluid-Dichteverhältnisse eine gute Übereinstimmung und somit die Bestätigung der Gleichungen (1.23) und (1.24) Csanadys.

Yeh & Lei [219] haben in ihrer Arbeit die Dispersion von sphärischen Feststoffpartikeln in einer abklingenden, isotropen Turbulenz unter dem Einfluss von Gravitationseffekten untersucht und hierbei eine gute Übereinstimmung für statistische Momente zweiter Ordnung, die Varianz der Partikelverschiebung, die Dispersionkoeffizienten nach Gl. (1.23) und (1.24) sowie die Standardabweichung der Geschwindigkeitsfluktuation festgestellt. Durch die Variation des Smagorinsky-Feinstrukturmodellkoeffizienten und der Rechengebietsgröße kamen Yeh & Lei zu dem Schluss, dass hauptsächlich große Wirbelstrukturen für die Partikelbewegung verantwortlich sind und der Einfluss kleiner turbulenter Längenmaße von geringerer Bedeutung ist.

Demgegenüber haben Wang & Maxey [209] und Yang & Lei [217] in ihren Arbeiten verdeutlicht, dass der Einfluss kleiner Längenmaße bei der Dispersion und Akkumulation von Partikeln in einem turbulenten Umfeld nicht zu vernachlässigen ist. Dabei untersuchten Yang & Lei, welche Rolle turbulente Skalen hinsichtlich der Sinkgeschwindigkeit individueller Partikel in einer isotropen, homogenen Turbulenz spielen. Vor dem Jahre 1980 war es allgemein anerkannt, dass die Sinkgeschwindigkeit individueller Partikel in einem turbulenten Fluid identisch ist mit der Sinkgeschwindigkeit in einem ruhendem Fluid. Maxey [112] zeigte jedoch, dass dies nur für Gas-Partikel-Strömungen zutrifft, in denen die Partikel eine zu vernachlässigende Massenträgheit haben, also sehr klein sind. Für finite Massenträgheiten der dispersen Phase, stellte er eine erhöhte Sinkgeschwindigkeit fest. Dieses Phänomen wurde von Maxey in [209] und auch von Yang & Lei bestätigt. Feststoffpartikel akkumulieren sich unter der Einwirkung von äußeren Körperkräften und aufgrund der Wirkung von Zentrifugalkrafteffekten in ringförmigen Wirbelstrukturen in Regionen geringer Wirbelstärken und hoher Scherraten, d.h. um einen Wirbelkern herum und auf der Seite, auf der die lokale Widerstandskraft kleiner als der durchschnittliche Wert ist. Dieser Vorgang ist in der Hauptsache für die Erhöhung der Sinkgeschwindigkeit der Partikel in einer turbulenten Strömung verantwortlich und wird durch ein turbulentes Längenmaß l_ω , das im Bereich des Maximums des Dissipationsspektrums liegt, bestimmt. Weiterhin ist die relative Erhöhung der Partikelsinkgeschwindigkeit auch von der lokalen Widerstandskraft, die auf ein individuelles Partikel wirkt, abhängig, die wiederum durch die großen energietragenden Wirbel beeinflusst wird. Für eine adäquate Simulation der Partikelbewegung in einer Gasströmung, die mit einer LES generiert wird, geben Yang & Lei eine auflösende Wellenzahl von $\kappa = 2,5/l_\omega$ an.

Einen weiteren Beitrag zur Evaluierung einer Zwei-Wege-Kopplung im Rahmen einer Euler-Lagrange-basierten LES einer turbulenten Zweiphasenströmung leisteten Boivin et al. [10]. Für ihre Untersuchung wählten Boivin et al. eine homogene, isotrope Turbulenz, in der für jede Parameterstudie 885000 Partikel transportiert wurden. Die Gitterauflösung variierten sie von 32^3 bis 96^3 Gitterpunkten. Ziel ihrer Studie war die Beschreibung des Einflusses des Impulsaustausches zwischen disperser und Trägergasphase aufgrund der Lagrange'schen Punkt-Kraft-

Approximation. Durch den Vergleich mit Gauß-gefilterten DNS-Daten zur Bestimmung des Feinstrukturanteils durch eine a priori-Abschätzung stellten Boivin et al. fest, dass die Vorhersage der lokalen Energieverteilung mit dem Smagorinsky-Modellansatz [173] sowie mit dem „scale-similarity“-Ansatz nach Bardina [5] nur unzureichend ist. Demgegenüber wird der Beitrag des Impulsaustausches zwischen den Phasen qualitativ besser bestimmt, wenn das aufgelöste Strömungsfeld zur Bestimmung des Feinstrukturanteils genutzt wird (sogenannte dynamische Feinstrukturmodellierung).

Elghobashi et al. [43] wiesen in ihrer Arbeit daraufhin, dass es sicherlich möglich ist, die LES für die Berechnung von turbulenten, dispersen Mehrphasenströmungen mit einer Ein-Wege-Kopplung zu nutzen. Wenn jedoch Effekte der Rückwirkung der Partikelbewegung auf die Fluidströmung an Bedeutung gewinnen, werden Modifikationen an der Feinstrukturmodellierung notwendig, die den Einfluss der Partikelphase berücksichtigen. Ein Ansatz für eine derartig modifizierte LES ist von Nadaoka et al. [127] unter der Bezeichnung LES-GAL¹¹⁾ vorgestellt worden. Ausgehend von einer über das Volumen einer Gitterzelle des numerischen Gitternetzes gemittelten Lagrange’schen Bewegungsgleichung wird eine Modifikation des Feinstrukturmodells für die Fluidströmungsberechnung mittels der Simulation abgeleitet.

Zwei interessante Arbeiten mit dem Hauptaugenmerk auf die Berücksichtigung des Einflusses der Partikelphase des Rahmen einer LES modellierten Feinstrukturanteils legten Lei et al. [97, 98] vor. Dabei wurde der Einfluss der dispersen Phase auf das Trägergas mit einer modifizierten Feinstrukturmodellierung auf Basis der Germano-Methode, d. h. mit einer dynamischen Modellkoeffizientenbestimmung vorgeschlagen, in der die Effekte der dispersen Phase aufgrund der energetischen Gleichverteilung von Produktion und Dissipation der Fluid-Partikel-Interaktionen nach einem Ansatz von Yuu [224] berücksichtigt wurde. In einer ersten Abschätzung und Validierung dieses Modellansatzes verglichen Lei et al. in [98] die vorgeschlagene Feinstrukturmodellierung anhand einer Partikel-beladenen, vertikalen Kanalströmung mit der Feinstrukturbeschreibung nach Smagorinsky [173], innerhalb derer die wandnahen Feinstrukturspannungen mit dem Van Driest’schen Ansatz [203] modifiziert wurden. Lei et al. berichteten von zufriedenstellenden Ergebnissen. Einen ersten Vergleich des neuen Ansatzes mit experimentellen Daten (Kulick et al. [87]) wurde in [97] gezeigt. Hierbei wurden auch Partikel-Partikel-Interaktionen (Kollisionseffekte) berücksichtigt. Des Weiteren wurde der Einfluss kleiner Wirbelstrukturen auf die Partikelbewegung durch einen „random-walk“-Ansatz berücksichtigt, im Rahmen dessen der Betrag der Feinstrukturgeschwindigkeits-Fluktuationen über den Deformationsgeschwindigkeitstensor und einer Gauß-verteilten Zufallszahl bestimmt wurde. Im Vergleich zwischen experimenteller Untersuchung und der numerischen Simulation konnten Lei et al. keine konsistente Übereinstimmung der Daten feststellen, jedoch kamen sie zu dem Schluss, dass es bei der Lagrange’schen Simulation der Partikelbewegung auf Basis einer LES unabdingbar ist, die Fluidfeinstrukturkomponenten mit zu berücksichtigen, da Partikel von verschiedenen großen, turbulenten Längenmaßen (Wirbel) entlang ihrer Trajektorie beeinflusst werden.

¹¹⁾engl.: Grid-Averaged-Lagrangian model

Resümee

Die vorangegangenen Betrachtungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

1. Aufgrund der vielfach berichteten guten Übereinstimmung von Simulation und Experiment verfügt die Methode der LES in Kombination mit einem Lagrange'schen Partikelverfolgungsverfahren für die numerische Vorhersage von turbulenten Mehrphasenströmungen über ein großes Potential.
2. Im Fall, dass Effekte der Rückwirkung der Partikelbewegung auf die Fluidströmung an Bedeutung gewinnen (Zwei-Wege-Kopplung), werden Modifikationen an der Feinstrukturmodellierung notwendig, die den Einfluss der Partikelphase berücksichtigen.

Dass die Modifikation der Feinstrukturmodellierung im Fall einer angewandten Zwei-Wege-Kopplung im Hinblick auf die Anwesenheit der dispersen Phase vielfach nicht vorgenommen wird, hat mehrere Gründe. Zum einen verweisen die Autoren auf Bedingungen, die eine Berücksichtigung nicht lohnenswert erscheinen lassen, so dass dadurch Ergebnisse eine bessere Güte erhalten. Zum anderen sind Modelle, die in der Lage sind, die Physik der kleinen Skalen in einer realistischen Art und Weise zu beschreiben, heutzutage noch Gegenstand der Forschung. Die vorliegende Arbeit soll durch die Berücksichtigung der Feinstrukturenergie, welche durch die Anwesenheit der dispersen Phase zusätzlich beeinflusst wird, hierzu einen Beitrag liefern.

Modellierung von Verdampfungsprozessen

Die Anwendung der LES in Kombination mit einem Lagrange'schen Tropfenverfolgungsverfahren zur Simulation von Verdampfungsprozessen steht heutzutage noch vielfach in ihren Anfängen. So wurden bisher im Rahmen der numerischen Berechnung technischer Strömungen beispielsweise im Bereich der ingenieurtechnischen Brennkammerauslegung nur wenige Arbeiten in der Fachliteratur veröffentlicht. Durch den vergleichsweise enormen, numerischen Aufwand (vgl. Kapitel 1.3.2.2), sind die wenigen Arbeiten nach Kenntniss des Autors bisher auf akademische Studien beschränkt. Die hierbei verwendeten Tropfenverdampfungsmodelle wurden in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellt (siehe auch Kap. 4.2). Durch die Besonderheit der LES, die Grobstruktur in einer turbulenten Strömung durch eine räumliche Filteroperation direkt zu berechnen und nur die verbleibende Feinstruktur zu modellieren, ergibt sich bezüglich einer Euler-Lagrange basierten Zwei-Wege-Kopplung die Notwendigkeit, die Effekte der dispersen Phase im Rahmen der Modellierung des Feinstrukturanteils zu berücksichtigen. Die Gruppe um Menon et al. hat hierzu mehrere Studien veröffentlicht [134, 158, 159].

In [134] untersuchten Pannala & Menon anhand einer Mischungsschicht mit verdampfenden Tropfen ein von ihnen vorgeschlagenes Modell zur numerischen Beschreibung der Tropfenverbrennung. Den Schwerpunkt ihrer Arbeit legten Pannala & Menon auf die Behandlung und Bestimmung des Quellterms zur Bilanzierung der verdampften Masse, der insbesondere von Tropfengrößenverteilungen abhängen, die kleiner als ein ad hoc gewählter „cut-off“-Wert waren, während Tropfen, deren Durchmesser im Rahmen der Verdampfung größer als der „cut-off“-Wert waren, mit den gewöhnlichen Quelltermformulierungen beschrieben wurden. Zur Beschreibung des ersteren schlugen Pannala & Menon eine Erweiterung des linearen

Wirbelschicht-Mischung-Modells (LEM)¹²⁾ für Einphasenströmungen vor, in Rahmen dessen Transportgleichungen für die Mischungsdichte und -temperatur auf einem eindimensionalen „sub“-Gitter zur Bestimmung des Volumenanteils der dispersen Phase bestimmt wurden. Im Vergleich zu einem konventionellen Ansatz, in dem die Tropfenmasse für Tropfendurchmessergrößen unterhalb des „cut-off“-Wertes im Gesamten der Trägergasphase hinzugeschrieben werden, berichteten Pannala & Menon von einer verbesserten Vorhersage des Massenbruchs der verdampfenden Phase, jedoch fehlt in ihrer Arbeit der Vergleich mit experimentellen Daten.

In einer weiteren Studie untersuchten Sankaran & Menon [159] eine verdrallte Strömung, wie sie etwa in Gasturbinenbrennkammern anzutreffen ist, in deren Umfang die Dispersion von Tropfen, die Modulation der Trägergasphase sowie die Verdampfung, Mischung und Verbrennung von Tropfen betrachtet wurden. Schwerpunkt der Arbeit war die Betrachtung von Verdrallungseffekten sowie die Freisetzung von Wärme aufgrund des Verdampfungs- und des Verbrennungsprozesses. Im Rahmen einer konsistenten Zwei-Wege-Kopplung (d. h. Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase bezüglich deren Rückwirkung auf die Grob- und Feinstruktur) verwendeten Sankaran & Menon u. a. eine Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie der Feinstruktur k^{sgs} , in der sie die disperse Phase in Form eines Quellterms

$$S_{k^{\text{sgs}}} = \langle \tilde{u}_i S_{u_i} \rangle - \tilde{u}_i S_{u_i} \quad (1.25)$$

berücksichtigten, wobei $\langle \cdot \rangle$ eine Volumenmittelung für alle Tropfen, die ein Kontrollvolumen durchqueren, charakterisierte. \tilde{u}_i stellte die aufgelöste Geschwindigkeit und S_{u_i} den Impulsquellterm der dispersen Phase dar. Zur Beschreibung des Feinstrukturanteils des Impulstransports, der Energie- und der Skalar-Transportgleichung verwendeten sie den Wirbelviskositäts- und den Wirbeldiffusitätsansatz. Den chemischen Quellterm zur Beschreibung der Tropfenverbrennung bestimmten Sankaran & Menon über einen Arrhenius-Ansatz. Als Ergebnis ihrer Studie, die sie wiederum ohne den notwendigen Vergleich mit experimentellen Daten vorlegten, betonten Sankaran & Menon die verstärkte Dispersion und die erhöhte Durchmischung der Tropfenphase aufgrund von Verdrallungseffekten. Insbesondere wurde eine Verringerung der inneren Rezirkulationszone durch die Wärmefreisetzung aufgrund von Verdampfungs- und Verbrennungssphänomenen beobachtet.

Resümee

Die bisher in der Fachliteratur veröffentlichten Arbeiten zeigen sehr deutlich, dass bei der Berechnung turbulenter Mehrphasenströmungen mit der Methode der LES, es insbesondere von Bedeutung ist, die Effekte der dispersen Phase nicht nur gegenüber der Grobstruktur zu berücksichtigen, sondern auch im Rahmen der Feinstrukturmodellierung. Die von Sankaran & Menon beschriebene Vorgehensweise (Betrachtung der Feinstrukturenergie und Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase in Form eines Quellterms) geht in diesem Zusammenhang in die richtige Richtung. Jedoch ist bekannt, dass die in Gl. (1.25) gezeigte Formulierung den rein dissipativen Einfluss der dispersen Phase auf die Trägergasströmung beschreibt. Die vorliegende

¹²⁾engl.: Linear Eddy Model

Arbeit greift diesen Ansatz auf und führt diesen durch eine neu-vorgeschlagene Formulierung, welche auch Phänomene der Turbulenzverstärkung berücksichtigen kann, weiter aus.

1.3.3 Hybride Modelle

Eine weitere Möglichkeit der mathematischen Beschreibung von Mehrphasenströmungen besteht in der Kombination des Euler-Euler- und des Euler-Lagrange-Modells in einem sogenannten Hybrid-Modell. Dabei verfolgt man das Ziel, die Vorteile des jeweiligen Modellierungsansatzes zu nutzen und somit eine genaue Beschreibung der betrachteten Mehrphasenströmung bei gleichermaßen reduziertem, numerischen Aufwand zu erhalten. Bezug nehmend auf die im letzten Abschnitt beschriebenen Charakteristika und Eigenschaften des Euler-Euler- und des Euler-Lagrange-Modells bedeutet dies im Fall des Euler-Euler-Modells einen verminderten numerischen und damit rechenzeitintensiven Aufwand, während das Euler-Lagrange-Modell den Vorteil bietet, eine genauere Vorhersage der dispersen Phase aufgrund der erleichterten Formulierung von Randbedingungen (Partikel-Wand-Interaktion, Partikel-Partikel-Stoß und Partikel-Agglomeration) zu erhalten. Bei der numerischen Simulation einer Düsen-Konfiguration bietet das Hybrid-Modell beispielsweise die Möglichkeit, für Bereiche, in denen ein dichtes Spray vorliegt (in Düsennähe) die Euler'sche Beschreibungsweise zu verwenden, während weiter entfernt von der Düse, in Bereichen, in denen ein dünnes Spray existiert, die Lagrange'sche Modellierung verwendet werden kann. In der Literatur sind jedoch nur wenige Arbeiten bekannt, die sich diese Strategie zu Nutze machen.

Schmehl et al. [162] berichten in ihrer Studie von der RANS-Simulation eines verdampfenden Sprühnebels in einer Gasturbinenbrennkammer. Für die numerische Abbildung des Trärgases und des Wandfilms verwendeten sie die Euler'sche Beschreibungsweise, während die Verteilung und der Verdampfungsprozess der Tropfenphase mit der Lagrange'schen Methode beschrieben wurde. In dem Lagrange'schen Teil wurde zudem ein Tropfen-Wand- und ein Tropfen-Film-Interaktionsmodell implementiert. Die Wechselwirkungen zwischen den drei Strömungsregimen des Trärgases und des Wandfilms auf der einen Seite und der Tropfenphase auf der anderen Seite wurden durch Austauschterme für Masse, Impuls und Energie beschrieben. Schmehl et al. kamen im Rahmen ihrer CFD-Analyse zu dem Schluss, dass die realistische Vorhersage der Verdampfungsrate im Wandfilm insbesondere von der genauen Beschreibung der Interaktionsphänomene, die im Rahmen des Euler-Lagrange-Modells verwendet wurden, abhing.

Burger et al. [14] haben in ihrer Arbeit den Effizienzgewinn durch die Kombination des Euler-Euler- und des Euler-Lagrange-Modells im Rahmen einer RANS-Simulation untersucht. Dabei betrachteten sie die Verteilung und Verdampfung eines Sprühnebelgemisches in einem Einspritzverteiler eines IC-Motors. Durch den Vergleich von experimentellen Daten mit Simulationsergebnissen basierend zum einen auf dem Euler-Euler-Modell, zum anderen auf dem Euler-Lagrange-Modell und einer Simulation mit dem Hybrid-Modell kamen Burger et al. zu dem Schluss, dass das Euler-Euler-Modell für sich genommen in einer vergleichsweise kurzen Rechenzeit qualitativ begrenzte Resultate liefert. Demgegenüber hatten die Resultate, die mit dem Euler-Lagrange-Modell erhalten wurden, eine deutlich verbesserte Vorhersagekraft der

Partikelgeschwindigkeiten gerade auch im wandnahen Bereich. Nach Burger et al. bietet das Hybrid-Modell im Allgemeinen einen guten Kompromiss zwischen numerischer Effizienz und der Qualität der erhaltenen Ergebnisse.

1.4 Zielsetzung

Basierend auf den in Kapitel 1.3.2.3 gemachten Anmerkungen soll die vorliegende Arbeit dazu beitragen, allgemein ein besseres Verständnis von Mehrphasenströmungen und dabei eine genauere Beschreibung der sich abspielenden physikalischen Interaktionsphänomene zwischen der Trägergasphase und der dispersen Phase zu erhalten. Insbesondere soll die im Rahmen der Grobstruktursimulation zur Schließung des Gleichungssystems verwendete Feinstrukturmodellierung und deren Adaption für Mehrphasenströmungen untersucht werden.

Im Einzelnen leiten sich aus dieser Globalzielsetzung folgende Detailziele ab:

- Es soll untersucht werden, inwieweit die Methode der Grobstruktursimulation die Modulation des Trägergases einer Mehrphasenströmung beschreiben kann. Dabei soll anhand der turbulenten kinetischen Energie und anhand von Energiedichtespektren diskutiert werden, ob die aus der Literatur bekannten Phänomene der Turbulenzabschwächung und -verstärkung abgebildet werden können.
- In diesem Zusammenhang soll untersucht werden, inwieweit die Verwendung einer Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie der Feinstruktur und deren Erweiterung für Mehrphasenströmungen die numerische Vorhersage dieser Phänomene verbessern. Hierfür soll ein neuer Ansatz zur Berücksichtigung des Einflusses der dispersen Phase auf die Fluidströmung vorgestellt werden.
- Für eine im Rahmen dieser Arbeit gerechnete Fallstudie, die vielfach mit Methoden der RANS berechnet wurde (Gitterturbulenz), sollen die Ergebnisse neben experimentellen Daten, mit Simulationen, die mit der statistischen Turbulenzmodellierung gewonnen wurden, verglichen werden. Dabei soll diskutiert werden, ob die erwartete Verbesserung den numerischen Mehraufwand der Grobstruktursimulation rechtfertigt.
- Im Weiteren soll untersucht werden, inwieweit die neu-vorgeschlagene Feinstrukturmodellierung und der darin enthaltenen Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase im Fall einer komplexen Strömung (verdrallte Strömung) die Vorhersage verbessert.
- Des Weiteren soll untersucht werden, inwieweit die Methode der LES in Kombination mit einem Lagrange'schen Tropfenverfolgungsverfahren die numerische Vorhersage von Verdampfungsprozessen verbessert.

Als Basis für die Umsetzung dieser Ziele dient das CFD-Programm FLOWSI, welches von Schmitt [164] für die DNS und LES isothermer Strömungen entwickelt wurde. Unger [202] untersuchte damit die ausgebildete Strömung in Rohren, Weinberger [213] erweiterte FLOWSI

für die Simulation ebener, reagierender und nicht-reagierender Freistrahlen, Forkel [47] und Kempf [75] führten erfolgreich Simulationen von Diffusionsflammen durch und Düsing [37] erweiterte das Programm für die Simulation von Vormischverbrennung. Klein [79] untersuchte mit FLOWSI anhand von DNS den primären Strahlzerfall in Einstoffzerstäuberdüsen. FLOWSI soll im Rahmen dieser Arbeit in mehrerer Hinsicht gezielt erweitert werden:

- a) Für die Simulation von Mehrphasenströmungen soll das Programm durch die Implementierung eines Partikel-Verfolgungs-Verfahrens auf Lagrange'scher Basis erweitert werden.
- b) Für die Berücksichtigung der wechselseitigen Interaktionsphänomene zwischen den Phasen sollen Quellterme formuliert werden, die den Austausch von Masse, Impuls und Energie zwischen der Grobstruktur und der dispersen Phase beschreiben.
- c) Insbesondere soll ein Eingleichungs-Feinstrukturmodell implementiert werden. Für die hierbei erforderliche numerische Beschreibung der turbulenten kinetischen Energie der Feinstruktur soll eine entsprechende Transportgleichung verwendet werden. Die Bestimmung der auftretenden Koeffizienten soll hierbei dynamisch erfolgen.
- d) Für die Berücksichtigung der durch die disperse Phase induzierten Turbulenzmodulation sollen Quellterme für die Transportgleichung der Feinstrukturenergie formuliert und implementiert werden.
- e) Für die numerische Beschreibung von Tropfenverdampfungsphänomenen soll das Programm durch die Implementierung eines Verdampfungsmodells erweitert werden.

1.5 Aufbau der vorliegenden Arbeit

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Grobstruktursimulation turbulenter Mehrphasenströmungen mit und ohne einen Phasenübergang der dispersen Phase. In Kapitel 1 wurde hierfür eine Einführung in die Thematik gegeben und die Motivation zur Durchführung dieser Arbeit beschrieben. Daran anknüpfend wurde eine Übersicht über den aktuellen Stand der Forschung im Bereich der numerischen Simulation disperser Mehrphasenströmungen gegeben, um dem Leser eine Einordnung der vorliegenden Arbeit in den wissenschaftlichen Kontext zu ermöglichen. Das Kapitel endet mit der aus dieser Betrachtung resultierenden Zielsetzung.

In Kapitel 2 werden die Grundlagen zur theoretischen und numerischen Beschreibung turbulenter Mehrphasenströmungen formuliert. Dazu wird zunächst eine phänomenologische Klassifizierung gegeben und eine Eingrenzung von Mehrphasensystemen, die im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden, vorgenommen. Anschließend werden die Bilanzgleichungen turbulenter Mehrphasenströmungen dargestellt und es wird auf die heutzutage gängigen Verfahren der Turbulenzmodellierung eingegangen.

Mit der Euler'schen Berechnung der Fluidströmung befasst sich Kapitel 3. Dabei wird zunächst auf die Elemente der LES eingegangen, die sich aus der Filteroperation ergebende Problematik der Schließung des Grundgleichungssystems erläutert und verschiedene Lösungsansätze

im Rahmen der Feinstrukturmodellierung beschrieben. Des Weiteren wird das numerische Lösungsverfahren (räumliche und zeitliche Diskretisierung) für die LES im Detail dargestellt. Im Anschluss daran werden einige Erläuterungen zur statistischen Auswertung von Mehrphasenströmungen gegeben.

In Kapitel 4 wird die disperse Phase in der Lagrange'schen Formulierung vorgestellt. Im Hinblick auf die Beschreibung von Verdampfungsprozessen wird eine Einführung in die Filmtheorie gegeben und das im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendete Verdampfungsmodell vorgestellt. Ein gesondertes Unterkapitel enthält die Darstellung der Phasenwechselwirkung. Daran anknüpfend wird die numerische Umsetzung der individuellen Partikel / Tropfen-Verfolgung beschrieben.

Kapitel 5 und 6 beschreiben Fallstudien ohne einen Phasenübergang der dispersen Phase, anhand derer die zuvor beschriebenen Feinstrukturmodelle und deren Erweiterungen im Hinblick auf die Modulation der induzierten Turbulenz validiert werden.

Inhalt des Kapitels 7 ist die Vorstellung einer Fallstudie, die die Verdampfung eines Sprühnebels in einer heißen Luftströmung beschreibt. Anhand dieser Konfiguration soll die Qualität der numerischen Vorhersage des ausgewählten Verdampfungsmodells untersucht werden. Die Qualität der erzielten Simulationsergebnisse wird mit Hilfe umfangreicher Auswertungen aus verschiedenen Blickwinkeln analysiert.

Kapitel 8 fasst die Arbeit zusammen und gibt ein Ausblick über die im Rahmen dieser Arbeit noch offen gebliebenen Fragen. Kapitel 9 beinhaltet die verwendeten Stoffwerte (Polynom-Approximationen).

2 Theoretische Grundlagen

Das vorliegende Kapitel untergliedert sich in zwei Teilbereiche. Aufbauend auf einer phänomenologischen Klassifizierung von Mehrphasensystemen und der Beschreibung von allgemein charakterisierenden Eigenschaften, erfolgt im zweiten Teil des Kapitels eine Beschreibung des Phänomens der Turbulenz. Danach werden die Bilanzgleichungen der Strömungsmechanik für Mehrphasenströmungen dargestellt und daran anknüpfend die häufig verwendeten Ansätze zur Turbulenzmodellierung gezeigt.

2.1 Charakterisierung von Mehrphasenströmungen

2.1.1 Phänomenologische Klassifizierung

Unter dem Begriff Mehrphasenströmungen versteht man im Allgemeinen die Koexistenz von zwei oder mehreren Phasenanteilen innerhalb eines Strömungsgebietes. Betrachtet man Gemische, in denen eine Phase ein Gas oder eine Flüssigkeit ist und somit in kontinuierlicher Form vorliegt, und die übrigen Phasenanteile in Form diskreter „Teilchen“ vorliegen, so bezeichnet man diese Phasengemische als disperse Mehrphasenströmungen.¹⁾ Einen ersten Ansatz für eine Klassifizierung der Mehrphasenströmungen bietet deren Unterteilung nach Aggregatzuständen der kontinuierlichen Phase und der in dem Mehrphasengemisch anzutreffenden dispersen Phasenanteilen. Diese Unterteilung bietet jedoch aus phänomenologischen Gesichtspunkten keine vernünftige Unterteilung von Mehrphasensystemen, da sich in Abhängigkeit des Volumenanteils der dispersen Phase sehr unterschiedliche Strömungsformen einstellen können. Beispielsweise reicht die für Gas-Feststoff-Strömungen zu beobachtende Bandbreite von freier Partikelbewegung (in Zyklonen) bis hin zu rezirkulierenden Wirbelschichten (in Silos). [48]

Aufgrund der Vielfalt von Mehrphasenströmungen ist eine einheitliche mathematisch-physikalische Modellbildung außerordentlich schwer, zumal weitere Einflussfaktoren wie die der Wechselwirkungen zwischen den Phasen hinzukommen. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Mehrphasenströmungen sollen daher hinsichtlich ihrer Art den folgenden Einschränkungen unterliegen:

¹⁾Im Gegensatz hierzu stehen Gemische oder Flüssigkeiten, bei denen die Stoffanteile homogen und auf molekularem Niveau durchmischt sind und sich als ein Kontinuum mit einheitlichen Stoffeigenschaften wie Dichte, Viskosität, Wärmekapazität und Wärmeleitung, usw. beschreiben lassen. Beispiele hierfür sind Luft oder Wassergemische. Strömungen derartiger Gemische werden zu den Einphasenströmungen gezählt und fallen je nach ihren stofflichen Eigenschaften in das Gebiet der klassischen Newton'schen Fluidodynamik beziehungsweise der Rheologie [48].

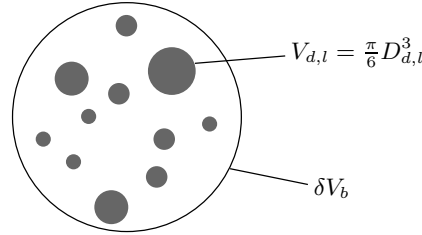


Abbildung 2.1: Volumetrischer Phasenanteil für ein beliebiges Kontrollvolumen δV_b

- Es werden verdünnte Mehrphasenströmungen betrachtet, bei denen der Volumenanteil der dispersen Phase innerhalb gewisser Grenzen (siehe Kapitel 2.1.4) verbleibt.
- Die Trägerströmung ist ein Newton'sches Fluid oder ein Gas. Sie wird im Rahmen dieser Arbeit als turbulent betrachtet. Eine Charakterisierung von turbulenten Strömungen wird in Kapitel 2.2 gegeben.
- Die makroskopischen Elemente der dispersen Phase werden als annähernd sphärische Kugeln angesehen. Sie beschränken sich auf nicht deformierbare Feststoff- oder Flüssigkeitspartikel (Tropfen).

2.1.2 Allgemeine Zustandsgrößen

Fluid-Partikel-Strömungen besitzen eine Reihe charakteristischer Merkmale, anhand derer eine Klassifizierung gegeben werden kann²⁾. Ein wesentlicher Parameter ist der Volumenanteil der beteiligten Phasen. Betrachtet man ein beliebiges Kontrollvolumen δV_b (Abb. 2.1), so ergibt sich der volumetrische Phasenanteil, bzw. Volumenanteil der dispersen Phase α_d , der den Anteil des durch die Partikel ausgefüllten Volumens δV_d darstellt, aus

$$\alpha_d = \frac{\delta V_d}{\delta V_b} = \frac{\sum_{l=1}^{\delta N} V_{d,l}}{\delta V_b} = \frac{\frac{\pi}{6} \sum_{l=1}^{\delta N} D_{d,l}^3}{\delta V_b}. \quad (2.1)$$

Dabei ist $D_{d,l}$ der Durchmesser eines individuellen Partikels l . Die Summation erfolgt über alle in dem Kontrollvolumen δV_b eingeschlossenen Partikel δN . Für den Phasenanteil der kontinuierlichen Phase α gilt dementsprechend:

$$\alpha = \frac{\delta V}{\delta V_b} \quad \text{mit:} \quad \alpha + \alpha_d = 1 \quad (2.2)$$

Die Gemischdichte der dispersen Phase σ_d stellt die Masse der Partikel pro Volumeneinheit des Gemisches dar:

$$\sigma_d = \frac{\delta m_d}{\delta V_b} = \frac{\rho_d \delta V_d}{\delta V_b} = \alpha_d \rho_d \quad (2.3)$$

²⁾nach [48, S. 12-15]

In ähnlicher Weise kann mit der Dichte des Fluids ρ die Gemischdichte des Fluids σ berechnet werden:

$$\sigma = \alpha\rho = (1 - \alpha_d)\rho \quad (2.4)$$

Für die Beschreibung von Fluid-Partikel-Gemischen ist weiterhin die Verwendung der Partikelanzahldichte N_b gebräuchlich:

$$N_b = \frac{\delta N}{\delta V_b} \quad (2.5)$$

Häufig wird die Partikelanzahldichte auf eine Zeitspanne δt bezogen. In diesem Fall wird von einer Partikelstromdichte $\dot{N}_b = N_b / \delta t$ gesprochen.

Zuweilen erfolgt die Beschreibung des Gemisches anhand der Massenbeladung Z , die sich aus dem Verhältnis des Partikelmassenstroms $\dot{m}_d = m_d / \delta t$ zu dem Massenstrom der kontinuierlichen Phase $\dot{m} = m / \delta t$ ergibt. Für eine lokale, auf das Kontrollvolumen δV_b bezogene Massenbeladung Z_L folgt:

$$Z_L = \frac{\dot{m}_d}{\dot{m}} = \frac{\alpha_d \rho_d u_d}{\alpha \rho U} \quad (2.6)$$

Des Weiteren finden für die Beschreibung von Fluid-Partikel-Strömungen die Volumenkonzentration c_{vol} und die Massenkonzentration c_m häufig Verwendung:

$$c_{vol} = \frac{\delta V_d}{\delta V} = \frac{\alpha_d}{\alpha} \quad ; \quad c_m = \frac{\delta m_d}{\delta m} = \frac{\alpha_d \rho_d}{\alpha \rho} \quad (2.7)$$

Neben diesen charakteristischen Größen, die die Volumen- und Massenverteilung beschreiben, sind kinematische Größen wie die Partikel-Reynoldszahl Re_d und die Partikelrelaxationszeit τ_d von Bedeutung, die anhand einer eindimensionalen, stark vereinfachten Partikelbewegungsgleichung, in der nur Trägheitseffekte und Widerstandskräfte berücksichtigt werden, verdeutlicht werden sollen:

$$\frac{du_d}{dt} = \frac{1}{\tau_d} \frac{C_W Re_d}{24} (U - u_d) \quad (2.8)$$

Die Partikel-Reynoldszahl Re_d und die Partikelrelaxationszeit τ_d definieren sich zu

$$Re_d = \frac{\rho D_d |U - u_d|}{\mu}, \quad (2.9)$$

$$\tau_d = \frac{\rho_d D_d^2}{18\mu}. \quad (2.10)$$

Der Widerstandsbeiwert C_W wird in Abhängigkeit von der Partikel-Reynoldszahl Re_d bestimmt (vgl. Kapitel 4.1.2). μ ist die dynamische Viskosität des Fluids. Für eine Stokes'sche, d. h. laminare Umströmung der Partikel, in deren Nachlauf die Strömung nicht abreißt, gilt näherungsweise $C_W Re_d / 24 \approx 1$. Die Partikelrelaxationszeit τ_d beschreibt die Zeit, die ein anfänglich in Ruhe befindliches Partikel benötigt, um auf ca. 63% ($\frac{e-1}{e} \approx 0,632$) der Fluidgeschwindigkeit

beschleunigt zu werden. Aus dem Verhältnis der Partikelrelaxationszeit τ_d und einem die umgebende Fluidströmung charakterisierenden Zeitmaß τ_s lässt sich eine Stokeszahl St definieren, die einen weiteren Parameter für die Beschreibung von Mehrphasenströmungen darstellt:

$$St = \frac{\tau_d}{\tau_s} \quad (2.11)$$

Hierbei wird das Zeitmaß τ_s aus globalen Strömungsgrößen abgeleitet; ein für die Strömung charakteristisches Längenmaß L (z.B. die Maschenweite eines verwendeten Gitters in einer isotropen, homogenen Turbulenz) sowie die mittlere charakteristische Geschwindigkeit U :

$$\tau_s = \frac{L}{U} \quad (2.12)$$

In einer turbulenten Strömung können jedoch die durch die turbulenten Schwankungsbewegungen gegebenen Zeit- und Längenmaße für die Partikelbewegung von Bedeutung sein, so dass hier τ_s mit dem Kolmogorov-Zeitmaß τ_k (Gl. (2.16)) abgeschätzt werden kann. Ist die so gebildete Stokes-Zahl sehr klein ($St \ll 1$), so hat das Partikel ausreichend Zeit, um auf Geschwindigkeitsänderungen des umgebenden Fluids zu reagieren. Vernachlässigt man den Einfluss der Schwerkraft und der Partikeldispersion aufgrund von diffusiven Kräften, so folgt dann ein betrachtetes Partikel der mittleren Fluidströmung nahezu ideal. In einer stationären Strömung sind dann die Partikelbahnen identisch mit den Bahnlinien des Fluids. Ist dagegen die Stokes-Zahl sehr groß ($St \gg 1$), so reagiert das Partikel nur sehr langsam auf die Änderungen in der Fluidströmung. Die Bewegung des Partikels wird in starkem Maße durch dessen Massenträgheit bestimmt. Dies kann beispielsweise häufige Kollisionen des Partikels mit der Strömungsberandung zur Folge haben. [48]

In der Literatur wird für die charakteristische Zeit des Strömungsfeldes τ_s keine einheitliche Definition in Verbindung mit der Stokes-Zahl gegeben, so dass bei der Verwendung der Stokes-Zahl als Charakteristikum für Mehrphasenströmungen Vorsicht geboten ist.

2.1.3 Verdünnte versus dichte Fluid-Partikel-Strömung

Ein weiteres Merkmal zur Klassifizierung von Zwei- oder Mehrphasenströmungen ist die Angabe, ob es sich bei der Betrachtung von Fluid-Partikel-Strömungen um eine sogenannte verdünnte oder eine dichte Strömung handelt. Eine Mehrphasenströmung wird als verdünnt bezeichnet, wenn die Partikelbewegung im Wesentlichen von aerodynamischen Kräften bestimmt wird, die das Fluid auf die Partikel ausübt. Im Gegensatz hierzu wird eine Fluid-Partikel-Strömung als dicht benannt, wenn die Partikelbewegung überwiegend durch die Kollisionen zwischen den Partikeln dominiert wird und aerodynamische Kräfte vergleichsweise eine untergeordnete Rolle spielen. Als quantitatives Maß zur Unterscheidung zwischen einer verdünnten und einer dichten Fluid-Partikel-Strömung kann das Verhältnis der Partikelrelaxationszeit τ_d zur mittleren Zeit zwischen zwei Partikelkollisionen τ_c herangezogen werden. Für die charakteristische Zeit zwi-

schen zwei Partikelkollisionen geben Crowe et al. in [27] eine Abschätzung an:

$$\tau_c = \frac{1}{f_c} = \frac{1}{N_b \pi D_d^2 |u_d - U|} \quad (2.13)$$

Hierbei ist f_c die Stoßfrequenz und N_b die in Gleichung (2.5) definierte Partikelanzahldichte. Im Fall einer verdünnten Strömung ist die aus dem Verhältnis der Partikelrelaxationszeit τ_d zur charakteristischen Partikelkollisionszeit τ_c gebildete Stokeszahl $St_{\text{coll.}} = \tau_d / \tau_c \ll 1$, so dass das Partikel zwischen zwei Kollisionen relativ viel Zeit hat, um auf die aerodynamischen Kräfte zu reagieren. Die Partikelbewegung wird durch die Wechselwirkung mit dem Fluid bestimmt. Im anderen Grenzfall der sogenannten dichten Strömung ist die Ansprechzeit des Partikels auf die Fluidkräfte wesentlich größer, als die Zeit bis zur nächsten Kollision. Hierfür gilt $St_{\text{coll.}} \gg 1$. Die Bewegung der Partikel ist durch die Kollisionen untereinander geprägt. In Gas-Feststoff-Strömungen mit einem deutlichen Dichteunterschied zwischen kontinuierlicher und disperser Phase ($\rho_d \gg \rho$) und einem Volumenanteil von $\alpha_d \approx 10^{-3}$ ist $St_{\text{coll.}} \approx O(1)$. Ab einer derartigen Beladung sind Partikel-Partikel-Stöße nicht mehr zu vernachlässigen und bei der Modellbildung zu berücksichtigen. [48]

2.1.4 Phasenwechselwirkung zwischen fluider und disperser Phase

Zur Charakterisierung von Mehrphasenströmungen ist die Betrachtung der Phasenwechselwirkung zwischen kontinuierlicher und disperser Phase von Bedeutung. In Abhängigkeit der Beladungsdichte treten unterschiedliche Effekte auf, so dass eine Bereichseinteilung in Abhängigkeit des Volumenanteils der Partikelphase α_d vorgenommen wird:

- Für $\alpha_d < 10^{-6}$ hat das Vorhandensein von Partikeln in der Fluidströmung praktisch keine signifikanten Auswirkungen auf das Strömungsfeld. In diesem Falle spricht man von Ein-Weg-Kopplung.
- In dem Bereich $10^{-6} < \alpha_d < 10^{-3}$ hat die Partikelbewegung einen merklichen Einfluss auf die Trägerströmung und führt zu qualitativen wie auch quantitativen Veränderungen des Fluidströmungsfeldes. Im Falle einer [...] Zwei-Wege-Kopplung findet eine Wechselwirkung zwischen den Phasen statt, die auf einer gegenseitigen Impulsübertragung beruht [48]. Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten verdampfenden Flüssigkeitspartikel spielt zudem die Übertragung von Masse und Wärme eine wichtige Rolle. Ist die betrachtete Fluid-Partikel-Strömung turbulent, so ist in Abhängigkeit von der Beladungsdichte zusätzlich auch der Einfluss der Fluidturbulenz auf die Partikelbewegung und die Rückwirkung der Partikelbewegung auf die Turbulenzintensität der Fluidströmung zu berücksichtigen. Hierbei kann es in Abhängigkeit des Partikeldurchmessers D_d und in Abhängigkeit des Volumenanteils der dispersen Phase sowohl zu einer Erhöhung als auch zu einer Dämpfung der Turbulenzintensität der Fluidströmung kommen.

- Für $10^{-3} < \alpha_d$ liegt der sogenannte Bereich der Vier-Wege-Kopplung vor, in dem zusätzlich Einflüsse der Partikelphase auf das Trägerfluid und Partikel-Partikel-Interaktionen (Stoßeffekte) bei der Modellbildung zu berücksichtigen sind.

2.2 Turbulente Strömungen

2.2.1 Beschreibung des Phänomens Turbulenz

Eine Vielzahl der in der Natur und Technik anzutreffenden Mehrphasenströmungen sind turbulent. Die Verwendung dieses Begriffs ist allgemein akzeptiert, jedoch ist eine eindeutige Definition von “Turbulenz” noch nicht formuliert worden. Vielmehr sind Strömungen turbulent, wenn sie

- unregelmäßig in Raum und Zeit - quasi-zufällig,
- dreidimensional,
- instationär,
- rotationsbehaftet,
- dissipativ sind,
- und eine starke Durchmischung

aufweisen. Durch die Dissipation wird kinetische Energie in Wärme umgewandelt. Eine stete Energiezufuhr ist daher notwendig, um die Strömung in Bewegung zu halten. Zudem ist Turbulenz durch erhöhte Diffusivität³⁾ charakterisiert.

Im Gegensatz hierzu stehen laminare Strömungen, die sich durch eine „gewisse“ Ordnung und Regelmäßigkeit auszeichnen. Die Trennung zwischen laminarer und turbulenter Strömung kann mit Hilfe der Dimensionsanalyse durch die dimensionslose Reynoldszahl⁴⁾ Re beschrieben werden:

$$Re = \frac{LU}{\nu} \quad (2.14)$$

Die mit den Referenzgrößen einer betrachteten Strömung einer typischen Länge L , einer typischen Strömungsgeschwindigkeit U und der kinematischen Viskosität ν gebildete Reynoldszahl beschreibt das Verhältnis von Trägheitskräften zu Reibungskräften. Turbulente Strömungen sind

³⁾Turbulenz ist ein rein konvektiver Prozess, dennoch hat sich der Begriff der erhöhten Diffusion eingebürgert. Da aufgrund der vorhandenen Wirbel die Gradienten verstärkt werden, gewinnt der Prozess der Diffusion an Bedeutung.

⁴⁾Benannt nach O. Reynolds [148].

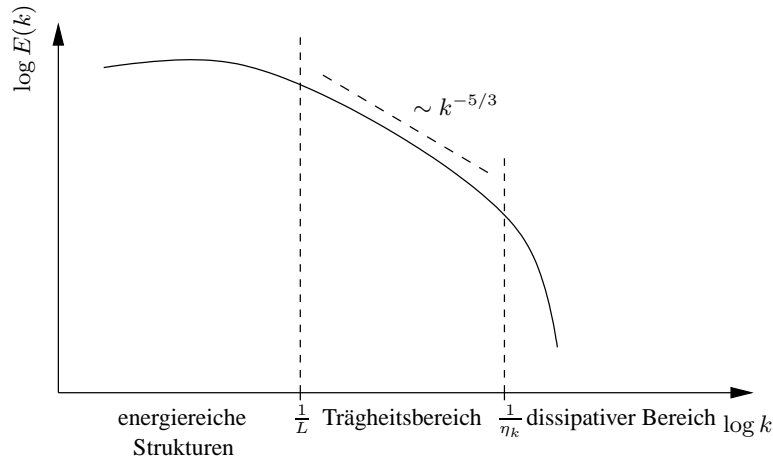


Abbildung 2.2: Energiespektrum einer turbulenten Strömung in doppel-logarithmischer Auftragung bei einer hohen Reynolds-Zahl

stets durch hohe Reynoldszahlen charakterisiert (Dominanz der Trägheitskräfte). Wenn die Reynoldszahl einer Strömung groß genug ist, können selbst kleinste Störungen, die in realen (technischen) Systemen immer vorhanden sind, nicht mehr gedämpft werden und haben dann langfristige und großskalige Auswirkungen. Die Folge ist der Umschlag der laminaren Strömung in eine turbulente Strömung (Transition) und die Entstehung von Turbulenz.

Turbulenz setzt sich aus einer Vielzahl von wirbelbehafteten Strukturen zusammen, die sowohl eine typische Größe, genannt Längenmaß, als auch eine typische Lebensdauer, das sogenannte Zeitmaß, aufweisen. Diese beiden charakteristischen Größen finden sich in den räumlichen beziehungsweise zeitlichen Energiespektren wieder, die in einer turbulenten Strömung einen kontinuierlichen Verlauf haben.

Abbildung 2.2 zeigt in Abhängigkeit von der Wellenzahl κ ein typisches Energiespektrum $E(\kappa)$ einer turbulenten Strömung bei einer hohen Reynoldszahl. Großskalige und damit energiereiche Strukturen befinden sich im Bereich kleiner Wellenzahlen und werden durch das Integrallängenmaß L repräsentiert. Der Betrag des Integrallängenmaßes ist durch die geometrischen Abmessungen der technischen Apparatur bestimmt. Den größeren Wirbelstrukturen wird kinetische Energie durch die mittlere Strömung zugeführt. Diese sind im Wesentlichen für den Transport von Masse, Impuls und Energie verantwortlich. Im Gegensatz hierzu treten kleine Wirbel unregelmäßig auf und sind verantwortlich für den quasi-zufälligen Charakter der Strömung (dissipativer Bereich). Man geht davon aus, dass die kleinen Wirbelstrukturen eine kurze Lebensdauer haben und im Wesentlichen isotrop, energiearm und universell sind. Sie weisen wegen des quasi-zufälligen Charakters der Turbulenz einen „Gedächtnisverlust“ auf, weshalb sie nicht von den globalen Geometrien der Strömung abhängen. Im Energiespektrum befindet sich der dissipative Bereich der Feinstrukturen bei großen Wellenzahlen κ . Den mittleren Energiefluss von den großen zu den nächst kleineren Wirbel, bis hin zu Wirbelstrukturen, deren Ausdehnung so klein ist, dass die molekularen Kräfte deren kinetische Energie in Wärme wandeln, bezeichnet

man als Energiekaskade. Die Rate, mit der dieser Vorgang vonstatten geht, nennt man Dissipationsrate ϵ . Eine Dimensionsanalyse mit ϵ und der kinematischen Viskosität ν führt zu den kleinsten auftretenden turbulenten Längen- und Zeitskalen, der Kolmogorov-Länge⁵⁾

$$\eta_k = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4} \quad (2.15)$$

und dem Kolmogorov-Zeitmaß

$$\tau_k = \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2}. \quad (2.16)$$

Durch die Kolmogorov-Länge wird die obere Grenze des Wellenzahlenbereichs im Energiespektrum festgelegt. Liegt eine genügend große Reynoldszahl vor, wird der Bereich der großen Wirbelstrukturen von dem Bereich der kleinen Feinstrukturen durch den sogenannten Trägheitsbereich⁶⁾ voneinander getrennt. In diesem überwiegen die Trägheitskräfte. Turbulente kinetische Energie wird weder produziert noch dissipiert, sondern momentan durch Wechselwirkungen benachbarter Wirbelstrukturen ausgetauscht. Dieser Bereich ist durch den $\kappa^{-5/3}$ -Abfall des Energiegehalts über der Wellenzahl bei doppellogarithmischer Auftragung von κ gekennzeichnet.

2.2.2 Bilanzgleichungen

Turbulente (Trärgas-) Strömungen, wie sie im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden, besitzen die Eigenschaft eines Kontinuums, da die mittlere freie Weglänge der Moleküle sehr viel kleiner als das Kolmogorov-Längenmaß ist. Die mathematische Beschreibung von turbulenten Mehrphasenströmungen basiert auf der Formulierung von Bilanzgleichungen, die aus der Betrachtung infinitesimaler Volumenelemente abgeleitet sind und die auf ein solches Element einwirkenden Volumen- und Oberflächenkräfte erfassen. Da in Mehrphasenströmungen mit einem Phasenübergang der dispersen Phase neben dem Massenumsatz der beteiligten Stoffe auch Wärme ausgetauscht wird, sind neben der Kontinuitätsgleichung und den Bilanzgleichungen für den Impuls zusätzlich Transportgleichungen für die Temperatur und die Massenanteile der verdampfenden Stoffe zu betrachten. Die Herleitung dieser Gleichungen kann verschiedenen Grundlagenbüchern entnommen werden (siehe Crowe [27]) und wird daher hier nicht weiter behandelt. Für ein Mehrphasensystem lautet die die Massenerhaltung beschreibende Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = S_\rho \quad \text{mit:} \quad S_\rho = \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} S_{\rho\alpha} \quad (2.17)$$

mit der Dichte ρ und dem Geschwindigkeitsvektor u_j . N_α bezeichnet die Anzahl der zu berücksichtigenden Stoffe α . S_ρ steht für den Quellterm, durch den die gesamte verdampfende Masse der N_α Stoffe infolge des Verdampfungsprozesses berücksichtigt wird.

⁵⁾Benannt nach A. Kolmogorov [84].

⁶⁾engl.: inertial subrange

Mit dem Druck p , dem Gravitationsvektor g_i und dem Quellterm S_{u_i} , der den Impulsaustausch zwischen fluider und disperser Phase beschreibt, ist die Gleichung der Impulserhaltung durch

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} T_{ij} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i + S_{u_i}, \quad i \in \{1, 2, 3\}. \quad (2.18)$$

gegeben, wobei der viskose Spannungstensor T_{ij} mit der kinematischen Viskosität ν für Newton'sche Fluide durch

$$T_{ij} = \rho \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \rho \nu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.19)$$

beschrieben werden kann. In Verbindung mit Gl. (2.19) ist die Impulsgleichung auch als Navier-Stokes-Gleichung bekannt.

Die Bilanzgleichung für einen verdampfenden Stoff α , beschrieben durch seinen Massenbruch Y_α , ist allgemein durch

$$\frac{\partial(\rho Y_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_\alpha u_j) = -\frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} + S_{\rho\alpha}, \quad \alpha \in \{1, N_\alpha\} \quad (2.20)$$

gegeben. Hierin bezeichnen $J_{\alpha j}$ den molekularen Diffusionsfluss des Stoffes α in der Koordinatenrichtung j . Der Diffusionsfluss ist durch das der Beschreibung der Massendiffusion zugrunde liegende Fick'sche Gesetz bestimmt, so dass

$$J_{\alpha j} = -\rho D_{\alpha m} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \quad (2.21)$$

gilt (das Subskript α stellt hierin keinen Summationsindex dar, sondern bezeichnet den betrachteten Stoff). Mit $D_{\alpha m}$ ist der polynäre Diffusionskoeffizient definiert, der die Intensität des diffusiven Austauschs des Stoffes α in Abhängigkeit der Konzentration der Mischung (Subskript m) beschreibt. Im Rahmen dieser Arbeit werden nur Mehrphasenströmungen mit $N_\alpha = 1$ behandelt. Daraus ergibt sich für den Diffusionskoeffizienten eine vereinfachte Schreibweise $D_{\alpha m} = \overline{D}_m$. Da im Rahmen dieser Arbeit für die Gasphase ausschließlich Luft verwendet wird, kann die Schmidt-Zahl zu $Sc = \nu / \overline{D}_m \approx 0,7$ gesetzt werden. Gleichung (2.20) ergibt sich schließlich zu

$$\frac{\partial(\rho Y)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\rho \nu}{Sc} \frac{\partial Y}{\partial x_j} \right) + S_\rho. \quad (2.22)$$

Zur Beschreibung der Energieerhaltung bieten sich verschiedene Größen zur Bilanzierung an: Temperatur, innere Energie oder Enthalpie. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Bilanzgleichung der Enthalpie h des Mehrphasengemisches verwendet, deren Transportgleichung

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) - \left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial J_{hj}}{\partial x_j} + S_h \quad (2.23)$$

lautet. In Gl. (2.23) ist durch J_{hj} der Einfluss des molekularen Enthalpietransports berücksichtigt. S_h beschreibt den Wärmeaustausch zwischen fluider und disperser Phase. Den Einfluss

thermischer Strahlung sowie Dissipationseffekte aufgrund der Änderung kinetischer Energien sind in Gl. (2.23) vernachlässigt. Zudem kann die am Fluid geleistete Arbeit aufgrund von Druckänderungen $\left(\frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j}\right)$ in guter Näherung gleichfalls vernachlässigt werden. Der molekulare Transport $J_{h,j}$ einer Mischung wird über die Anteile aus Wärmeleitung und Enthalpiediffusion beschrieben,

$$J_{h,j} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\beta=1}^{N_\beta} h_\beta J_{\beta,j}, \quad \beta \in \{1, N_\beta\}. \quad (2.24)$$

Neben der Verwendung von Definition (2.21) für den Diffusionsfluss der Enthalpie $J_{\beta,j}$ bezeichnet λ die Wärmeleitfähigkeit, T die Temperatur, h_β die stoffspezifische Enthalpie sowie β den Summationsindex bei der Berücksichtigung der Trägergasphase (N_β ist Zwei für eine Zweiphasenströmung). Die stoffspezifische Enthalpie ist über

$$h_\beta = h_{\beta 0} + \int_{T_0}^T c_{p,\beta}(\theta) d\theta \quad (2.25)$$

definiert. $h_{\beta 0}$ bezieht sich auf die Referenztemperatur T_0 , θ ist die Integrationsvariable der Temperatur. Die temperaturabhängigen, spezifischen Wärmekapazitäten sind mit $c_{p,\beta}$ bezeichnet. Aus der Summierung der gewichteten Enthalpien h_β der beteiligten Stoffe ergibt sich wiederum die Gesamtenthalpie h des Gemisches,

$$h = \sum_{\beta=1}^{N_\beta} Y_\beta h_\beta \quad (2.26)$$

Unter Verwendung der Prandtl-Zahl $Pr \approx 1.0$ kann die Wärmeleitfähigkeit λ der Mischung in Gl. (2.24) abgeschätzt werden als

$$\lambda = \frac{\rho \nu c_p}{Pr}, \quad (2.27)$$

wobei die spezifische Wärmekapazität der Mischung c_p aus

$$c_p = \sum_{\beta=1}^{N_\beta} Y_\beta c_{p,\beta} \quad (2.28)$$

erhalten wird.

Mit Gl. (2.21) kann die Erhaltungsgleichung für die Enthalpie schließlich als

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h u_j) = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\frac{\rho \nu c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_j} - \frac{\rho \nu}{Pr} \sum_{\beta=1}^{N_\beta} h_\beta \frac{\partial Y_\beta}{\partial x_j} \right) + S_h \quad (2.29)$$

geschrieben werden. Da den sieben unbekannten Größen ρ , p , u_i , h und T lediglich die fünf Gleichungen (2.17), (2.18) und (2.29) gegenüber stehen, sind zur Schließung des gesamten Gleichungssystems zwei weitere Gleichungen zu formulieren. Mit Gl. (2.25) und Gl. (2.26) ergibt sich die kalorische Zustandsgleichung einer Mischung idealer Gase zu

$$h = \sum_{\beta=1}^{N_\beta} Y_\beta \left(h_{\beta 0} + \int_{T_0}^T c_{p\beta}(\theta) d\theta \right), \quad (2.30)$$

sowie die thermische Zustandsgleichung

$$p = \rho R_m T \quad \text{mit:} \quad R_m = \bar{R} \sum_{\beta=1}^{N_\beta} \frac{Y_\beta}{\mathcal{M}_\beta}. \quad (2.31)$$

Die in Gl. (2.31) eingehenden Variablen bezeichnen die Gaskonstante der Mischung R_m , die universelle Gaskonstante \bar{R} , sowie die Molmasse \mathcal{M}_β des Stoffes β . Der Zusammenhang zwischen Enthalpie und Temperatur ist über die spezifische Wärmekapazität des Gemisches c_p und die Stoffenthalpie h_β nach Gl. (2.25) und (2.26) gegeben.

Somit ist durch die Gleichungen (2.17) - (2.31), die eng über die veränderliche Dichte miteinander gekoppelt sind, eine mathematische Beschreibungsweise gegeben, die den momentanen Zustand des Fluids definiert. Für eine vollständige Betrachtungsweise ist die Beschreibung der Quellterme der dispersen Phase aus Betrachtungen des Verdampfungsprozesses und den Wechselwirkungen des Impulses abzuleiten (siehe Kapitel 4.3).

2.2.3 Ansätze zur Modellierung von turbulenten Skalen

Die Lösung der im vorherigen Abschnitt formulierten Grundgleichungen (2.17) - (2.31) mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen ist numerisch schwierig zu bestimmen, weil mit der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung die Kolmogorov-Länge η_k und -Zeit τ_k aufgelöst werden müssen. Die am häufigsten eingesetzten Ansätze zur Modellierung von turbulenten Skalen lassen sich in drei Klassen unterteilen.

2.2.3.1 Direkte Numerische Simulation

Prinzipiell kann das Gleichungssystem (2.17) - (2.31) mit geeigneten Verfahren räumlich und zeitlich diskretisiert und numerisch gelöst werden [47]. Mit dieser, als Direkte Numerische Simulation (DNS)⁷⁾ bezeichneten Vorgehensweise kann die gesamte, in den Gleichungen enthaltene Information über das Strömungs- und Skalarfeld bestimmt werden. Wegen des enormen numerischen Aufwands ist eine praktische Durchführung jedoch auf niedrige Reynolds-Zahlen und

⁷⁾engl.: **D**irect **N**umerical **S**imulation

einfache Geometrien beschränkt. Die Ursache für den großen Aufwand besteht in der erforderlichen feinen Diskretisierung des betrachteten Rechengebiets. Das Verhältnis einer charakteristischen turbulenten Länge l zum Kolmogorov-Maß η_k bestimmt die Anzahl der zu verwendenden Gitterpunkte und folgt nach einer dimensionsanalytischen Betrachtung aus der turbulenten Reynoldszahl Re_t ,

$$l/\eta_k = Re_t^{3/4}. \quad (2.32)$$

Die turbulente Reynoldszahl wird mit der turbulenten kinetischen Energie $k = \frac{1}{2} \langle u'_i u'_i \rangle$ (siehe Kapitel 3.3.2)

$$Re_t = \frac{l \cdot (2k)^{1/2}}{\nu} \quad (2.33)$$

gebildet. Für die dreidimensionale Berechnung folgt die Gitterpunktzahl zur Auflösung eines turbulenten Längenmaßes zu

$$N_{\text{erf.}} = \left(\frac{l}{\eta_k} \right)^3 = Re_t^{9/4}. \quad (2.34)$$

Diese exponentielle Abhängigkeit der notwendigen Gitterpunktzahl von der turbulenten Reynoldszahl verhindert die Verwendung der DNS in Konfigurationen mit hohen Reynoldszahlen. Beispielsweise gibt Forkel [47] für die Direkte Numerische Simulation einer Freistrahlsströmung bei einer Reynoldszahlen von 10^6 eine Gitterpunktzahl von 10^{15} an. Bei derzeitigen (Sommer 2004) Hochleistungsrechnern ist die Berechnung von Konfigurationen mit $5 \cdot 10^7$ Gitterpunkten realistisch.

2.2.3.2 Reynoldsmittelung

Für die Optimierung und Auslegung technischer Anlagen ist häufig die Kenntnis des zeitlich gemittelten Strömungs- und Skalarfeldes ausreichend. Es liegt daher nahe, Erhaltungsgleichungen für die statistischen Momente der Strömungs- und Skalargrößen zu lösen. Im Rahmen dieser Vorgehensweise, die nach dessen Begründer O. Reynolds [148] benannt ist, spaltet man den Momentanwert einer Größe

$$\psi = \langle \psi \rangle + \psi' \quad (2.35)$$

in den statistischen Mittelwert $\langle \psi \rangle$ (siehe Kapitel 3.3.2) und einen turbulenten Schwankungsanteil ψ' auf. Für die Mittelwerte der Impulskomponenten erhält man durch statistische Mittelung der Navier-Stokes-Gleichungen (Gl. (2.18)) Transportgleichungen,

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle \rho u_i \rangle + \frac{\partial}{\partial x_j} \langle \rho u_i u_j \rangle = \frac{\partial}{\partial x_j} \langle T_{ij} \rangle - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} + \langle \rho g_i \rangle, \quad (2.36)$$

die zusammengefasst werden als RANS⁸⁾-Gleichungen. Die Felder der gemittelten Größen weisen einen „glatten“ Verlauf auf und die numerische Auflösung ist um Größenordnungen kleiner als bei einer DNS.

⁸⁾engl.: Reynolds-Averaged-Navier-Stokes

In den gemittelten Gleichungen treten aufgrund der Nichtlinearität des Konvektionsterms nicht geschlossene Terme, die sogenannten Reynolds-Spannungen

$$\langle u'_i u'_j \rangle = \langle u_i u_j \rangle - \langle u_i \rangle \langle u_j \rangle, \quad (2.37)$$

auf. Diese beschreiben die Wirkungen der turbulenten Fluktuationen auf die mittlere Strömung. Für diese unbekannten Momente können Transportgleichungen hergeleitet werden, in denen jedoch aufgrund der angewandten Mittelung neue unbekannte Momente auftreten. Es besteht somit ein Schließungsproblem, welches auf irgendeiner Stufe abgebrochen werden muss. Die verbleibenden unbekannten Terme müssen dann durch Modelle oder durch empirische Annahmen beschrieben werden. Die statistischen Turbulenzansätze unterscheiden sich durch die Anzahl der Gleichungen, die zur Modellierung der nichtgeschlossenen Terme zusätzlich gelöst werden müssen. In den Nullgleichungsmodellen werden die Reynolds-Spannungen als Funktion des mittleren Geschwindigkeitsgradienten dargestellt. Eingleichungsmodelle basieren beispielsweise auf der Lösung der Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie, die sich aus der halben Spur des Reynolds-Spannungstensors in Gl. (2.37) ergibt. Das k - ε -Modell, als den bekanntesten Vertreter der Zweigleichungsmodelle, beruht auf der Lösung der Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie und deren Dissipation. Im Rahmen der Anwendung von Reynolds-Spannungsmodellen werden Gleichungen für den Reynolds-Spannungstensor und der Dissipation gelöst.

Geeignet sind die statistischen Turbulenzmodelle in Strömungen mit hohen Reynoldszahlen. Der spektralen und zeitlichen Mittelung über alle turbulenten Skalen liegt die Annahme der spektralen Ähnlichkeit zugrunde, die besagt, dass sich alle Längen- und Zeitmaße auf ein einziges Längen- beziehungsweise Zeitmaß zurückführen lassen.

2.2.3.3 Grobstruktursimulation

Einen Kompromiss zwischen den statistischen Ansätzen der RANS-Modellierung und der DNS stellt die Methode der Grobstruktursimulation (LES)⁹⁾ dar. Im Rahmen der Anwendung dieser Methode wird das Strömungs- und Skalarfeld lokal räumlich gefiltert, wodurch eine Aufspaltung im turbulenten Energiespektrum in einen großskaligen Bereich, genannt Grobstruktur (gs¹⁰⁾) und in einen kleinskaligen Bereich, genannt Feinstruktur (sgs¹¹⁾) erfolgt. Die resultierenden Differentialgleichungen beschreiben das zeitliche Verhalten der großskaligen, turbulenten Bewegung, der sogenannten Grobstruktur, welche direkt simuliert wird. Den Einfluss der nicht aufgelösten, kleinen Skalen hingegen, der sogenannten Feinstruktur, gibt ein Modellansatz wieder. Die Methode der LES hat folgende Eigenschaften:

- Die LES setzt große Reynoldszahlen voraus. Die Modellierung der weitestgehend Geometrie unabhängigen Feinstruktur zeigt die Perspektive dieser Methode, auch in anwendungsnahen (technischen) Strömungen eingesetzt zu werden.

⁹⁾engl.: Large Eddy Simulation

¹⁰⁾engl.: grid-scale

¹¹⁾engl.: sub-grid-scale

- Die LES unterliegt nicht der einschränkenden Annahme der spektralen Ähnlichkeit, so dass Übergänge zwischen Strömungsformen erfasst werden können.
- Durch die direkte Simulation der großskaligen Turbulenz wird im Wesentlichen der Bereich dargestellt, der die Produktion der turbulenten kinetischen Energie, als auch die auftretenden Impuls- und Wärmeflüsse bestimmt. Das ist im Zusammenhang mit der Berechnung von Mehrphasenströmungen mit Phänomenen eines Phasenübergangs der dispersen Phase sehr wichtig.
- Aus der Datenbasis einer LES lassen sich nach einer statistischen Auswertung neben den Mittelwerten der gefilterten Strömungsgrößen auch Momente höherer Ordnung bestimmen. Diese Größen werden in den statistischen Methoden durch Modellansätze dargestellt. Hieraus ergibt sich das Potential der LES zur Bewertung und Entwicklung statistischer Modellformulierungen.

3 Euler'sche Berechnung der Fluidströmung

Das vorliegende Kapitel befasst sich mit der numerischen Beschreibung turbulenter Mehrphasenströmungen auf Basis des in Kapitel 1.3.2 beschriebenen Euler-Lagrange-Verfahrens. Dazu wird zunächst auf die Euler'sche Berechnung der Trägergasphase eingegangen, die im Rahmen dieser Arbeit mit der Methode der LES beschrieben wird. In Kapitel 2.2.3.3 wurden die Eigenschaften der LES in groben Zügen umrissen, in diesem Kapitel soll nun näher auf die Elemente der LES, wie die Filterung und Modellierung der sich aus der Filteroperation ergebenden Feinstrukturspannungen eingegangen werden. Hierzu werden zwei Alternativen der Feinstrukturmodellierung dargestellt. Danach wird die räumliche und zeitliche Diskretisierung des verwendeten numerischen Verfahrens beschrieben und abschließend einige Erläuterungen zur statistischen Auswertung von Mehrphasenströmungen gegeben.

3.1 Elemente der Grobstruktursimulation

3.1.1 Filterung

Die LES beruht auf der Trennung der kleinen von den großen Skalen durch Anwendung einer Filteroperation. Diese führt zu der folgenden Zerlegung einer Strömungsgröße $\psi(\vec{x}, t)$,

$$\psi(\vec{x}, t) = \bar{\psi}(\vec{x}, t) + \psi'(\vec{x}, t). \quad (3.1)$$

$\bar{\psi}(\vec{x}, t)$ repräsentiert den Tiefpass-gefilterten Bereich des Energiespektrums, Grobstruktur genannt, während $\psi'(\vec{x}, t)$ die Feinstruktur, d.h. den kleinskaligen Anteil darstellt. Die Filteroperation stellt mathematisch gesehen eine Faltung der betrachteten Strömungsgröße mit einer Filterfunktion $h(\vec{x} - \vec{x}_1, \Delta)$ in einem betrachteten Rechenvolumen V dar [99],

$$\bar{\psi}(\vec{x}, t) = \int_V h(\vec{x} - \vec{x}_1, \Delta) \psi(\vec{x}_1, t) d\vec{x}_1. \quad (3.2)$$

Die Filteroperation gründet sich allein auf eine Filterung im Raum. Die Berücksichtigung der Zeit in Gl. (3.2) ist im Rahmen einer LES nur dann erforderlich, wenn langwellige Strukturen hochfrequent angeregt werden. Als Filterfunktion eignet sich im Prinzip jeder Tiefpassfilter. In der Regel wird jedoch eine der folgenden Filterungen angewendet:

Idealer Filter: Entfernung aller Frequenzen höher als eine Grenzfrequenz

Gauß-Filter: Sowohl im spektralen als auch im physikalischen Raum

„top-hat“-Filter: Bildung des integralen Mittelwerts über eine Gitterzelle

„volume-balance“: Für Skalare räumlicher „top-hat“, für die Impulskomponenten jeweils Flächenmittelwert über die in Wirkrichtung der Komponente versetzte Zellwand

Die Verwendung eines Idealen Filters und des Gauß-Filters ist vor allem dann sinnvoll, wenn die Diskretisierung des Rechengebiets im Frequenzraum vorgenommen wird, während sich der „top-hat“-Filter, dessen Funktionsvorschrift in Gl. (3.3) gegeben ist, sowie die Methode des „volume-balance“ sich bei der Verwendung der finiten Volumen als Diskretisierung eignen. Die Filteroperation (Gl. (3.2)) stellt eine kontinuierliche Filterung dar. Demgegenüber hat Schumann [165] in Anlehnung der Verwendung des „volume-balance“ eine andere Methode entwickelt. Aus der Integration der Massen- und Impulserhaltungsgleichungen über die Maschenvolumina des Rechnernetzes ergeben sich gefilterte Größen. Aus der anschließenden Anwendung des Gauß’schen Integralsatzes ergeben sich Werte, die als Flächenmittelwerte anzusehen sind. Diese sind an den Oberflächen der Maschenvolumina lokalisiert. Analog ergeben sich Volumenmittelwerte in den Maschenmittelpunkten. Das Gitter stellt sich somit als diskreter Filter dar, wobei die Maschenweite gleich der Filterweite ist.

$$h(\vec{x} - \vec{x}_1, \Delta) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & , \quad |\vec{x} - \vec{x}_1| \leq \Delta/2 \\ 0 & , \quad |\vec{x} - \vec{x}_1| > \Delta/2 \end{cases} \quad (3.3)$$

Mit der Schumann’schen Vorgehensweise leitet sich die diskretisierte Integralform aus den gefilterten differentiellen Grundgleichungen ab, so dass diese leicht in das Konzept der finiten Volumen einzubinden sind. Nachteilig ist jedoch, dass zwischen der physikalischen Filterung und der numerisch bedingten Diskretisierung nicht unterschieden wird. Zudem werden Dichte und Impulskomponenten über unterschiedliche Gebiete gemittelt. Aufgrund dessen wurde von Forkel [47] die für das verwendete Programm FLOWSI ursprünglich entwickelte Filterformulierung auf Basis des „volume-balance“ auf „top-hat“-Filterung umgestellt.

Die Grenzfrequenz oder die Filterweite Δ beschreibt die Grenze zwischen aufgelöster Struktur (Grobstruktur) und der mittels eines Modells berechneten Feinstruktur. Aus den Zellabmessungen der jeweiligen Koordinatenrichtung $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ kann die Filterweite auf verschiedene Weise erhalten werden:

$$\bar{\Delta}_1 = \sqrt[3]{\Delta x \Delta y \Delta z} \quad (3.4)$$

$$\bar{\Delta}_2 = \sqrt{\frac{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}{3}} \quad (3.5)$$

$$\bar{\Delta}_3 = \max \{ \Delta x, \Delta y, \Delta z \} \quad (3.6)$$

Für Gitterzellen mit gleicher Kantenlänge sind alle drei Varianten identisch. Für ungleiche Zellabmessungen in den jeweiligen Raumrichtungen ist die erste Variante ungeeignet. Für das im Rahmen dieser Arbeit verwendete zylindrische Gitter ist es zweckmäßig der Argumentation von Unger [202] zu folgen und die Filterweite gemäß $\bar{\Delta}_2$ festzulegen. Die Kopplung von Filter- und Maschenweite hat den Vorteil, dass für kleiner gewählte Filterweiten die Grobstruktursimulation schließlich in eine Direkte Numerische Simulation übergeht.

Die Anwendung der Filteroperation auf die Gleichungen (2.17), (2.18), (2.22) und (2.29) führt auf die folgenden, die Grobstruktur eines Fluids beschreibenden Gleichungen:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_j) = \bar{S}_\rho \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} u_i u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \nu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_{u_i} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Y) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} Y u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\bar{\rho} \nu}{Sc} \left(\frac{\partial Y}{\partial x_i} \right) \right] + \bar{S}_\rho \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} h) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} h u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\bar{\rho} \nu}{Pr} \left(c_p \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\beta=1}^{N_\beta} h_\beta \frac{\partial Y_\beta}{\partial x_j} \right) \right] + \bar{S}_h \quad (3.10)$$

Um die formale Struktur möglichst einfach zu halten, werden die Geschwindigkeitskomponenten, die Viskosität, die spezifische Wärmekapazität, der Massenbruch des verdampfenden Stoffes sowie die Enthalpie als gefilterte Werte $\tilde{u}_i, \tilde{\nu}, \tilde{c}_p, \tilde{Y}, \tilde{h}$ eingeführt. Die Diffusionsterme werden dann durch die entsprechenden Ausdrücke in diesen Größen

$$\bar{\rho} \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \nu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \approx \bar{\rho} \tilde{\nu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{\nu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.11)$$

$$\frac{\bar{\rho} \nu}{Sc} \left(\frac{\partial Y}{\partial x_i} \right) \approx \frac{\bar{\rho} \tilde{\nu}}{Sc} \left(\frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \right), \quad (3.12)$$

$$\frac{\bar{\rho} \nu}{Pr} \left(c_p \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{\beta=1}^{N_\beta} h_\beta \frac{\partial Y_\beta}{\partial x_j} \right) \approx \frac{\bar{\rho} \tilde{\nu}}{Pr} \left(\tilde{c}_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{\beta=1}^{N_\beta} \tilde{h}_\beta \frac{\partial \tilde{Y}_\beta}{\partial x_j} \right) \quad (3.13)$$

ersetzt. Diese Umformung ist nur für konstante Stoffwerte exakt. Jedoch ist der durch die Näherung begangene Fehler gegenüber der Modellierung klein und kann vernachlässigt werden. Den noch zu schließenden Term $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j = \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ spaltet man in den aufgelösten Anteil $\tilde{u}_i \tilde{u}_j$ und den Feinstrukturanteil T_{ij}^{sgs} auf (analog für $\bar{\rho} \tilde{Y} u_j$ und $\bar{\rho} \tilde{h} u_j$):

$$\widetilde{u_i u_j} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j - T_{ij}^{\text{sgs}} \quad (3.14)$$

$$\widetilde{Y u_j} = \tilde{Y} \tilde{u}_j - Y^{\text{sgs}} \quad (3.15)$$

$$\widetilde{h u_j} = \tilde{h} \tilde{u}_j - h^{\text{sgs}} \quad (3.16)$$

Somit lautet das zu lösende Gleichungssystem:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = \bar{S}_\rho \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \tilde{\nu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{\nu} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \bar{\rho} T_{ij}^{\text{sgs}} \right] \\ - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho} g_i + \bar{S}_{u_i} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\bar{\rho} \tilde{\nu}}{Sc} \left(\frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \right) + \bar{\rho} Y^{\text{sgs}} \right] + \bar{S}_\rho \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\bar{\rho} \tilde{\nu}}{Pr} \left(\tilde{c}_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{\beta=1}^{N_\beta} \tilde{h}_\beta \frac{\partial \tilde{Y}_\beta}{\partial x_j} \right) + \bar{\rho} h^{\text{sgs}} \right] + \bar{S}_h \quad (3.20)$$

Bis auf die zu modellierenden Feinstrukturterme ist dieses Gleichungssystem formal gleich dem für die ungefilterten Gleichungen. Die Feinstrukturterme müssen deshalb für die Wirkung der Feinstruktur auf die aufgelöste Grobstruktur stehen.

Die nicht-geschlossenen Terme T_{ij}^{sgs} , Y^{sgs} und h^{sgs}

$$T_{ij}^{\text{sgs}} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \widetilde{u_i u_j} \quad (3.21)$$

$$Y^{\text{sgs}} = \tilde{Y} \tilde{u}_j - \widetilde{Y u_j} \quad (3.22)$$

$$h^{\text{sgs}} = \tilde{h} \tilde{u}_j - \widetilde{h u_j} \quad (3.23)$$

müssen mit einem Feinstrukturmodell modelliert werden. Im Folgenden wird nach einer kurzen Betrachtung der Verdampfung - Turbulenz - Interaktion auf die Modellformulierung zur Schließung der vektoriellen Feinstrukturspannungen T_{ij}^{sgs} eingegangen und abschließend die Modellierung der skalaren Feinstrukturterme Y^{sgs} und h^{sgs} vorgestellt.

Kommentar zur Verdampfung - Turbulenz - Interaktion

Für die im Rahmen dieser Arbeit angewandte Grobstruktursimulation werden gefilterte Werte für die vom Massenbruch Y abhängigen Skalare wie beispielsweise der Dichte der Mischung in Gl. (2.31) oder der Enthalpie aus Gl. (2.26) benötigt. Aufgrund der im Allgemeinen nichtlinearen Abhängigkeit kann eine Größe ψ nicht einfach durch Auswertung an der Stelle \tilde{Y} bestimmt werden. Für eine genaue Auswertung muss die Verteilungsdichtefunktion der Feinstruktur bekannt sein. Da dies jedoch nicht der Fall ist, wird häufig näherungsweise eine Verteilung mit angenommener Form verwendet. Basierend auf einer sogenannten β -Funktion ergeben sich die gefilterten Größen in Abhängigkeit von gefiltertem Massenbruch und seiner Varianz.

Für die hier betrachteten Gemische, kann diese Modellierung jedoch vernachlässigt werden. Dazu ist in Abbildung 3.1 die sich darstellende Dichte der Mischung Luft/Isopropanol in Abhängigkeit des Massenbruchs Y gezeigt. Für maximal auftretende Werte von $Y = 0,25$ ist

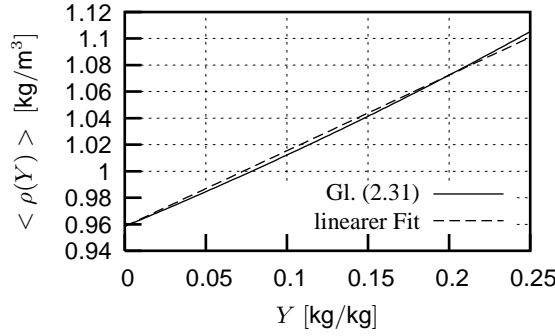


Abbildung 3.1: Abhängigkeit der Dichte der Mischung (Luft/Isopropanol) vom Massenbruch des Stoffes Y bei einer Referenztemperatur von $T_{\text{ref.}} = 353,15 \text{ K}$

aufgrund von gegebenen Temperaturen ein fast linearer Zusammenhang gegeben. Die Abweichung beträgt maximal 1 %, so dass im Weiteren gilt

$$\overline{\psi(Y)} = \psi(\tilde{Y}). \quad (3.24)$$

Somit ergibt sich die gefilterte kalorische, beziehungsweise thermische Zustandsgleichung nach

$$\tilde{h} = \sum_{\beta=1}^{N_{\beta}} \tilde{Y}_{\beta} \tilde{h}_{\beta 0} + \bar{c}_{p\beta} \tilde{Y}_{\beta} \tilde{T} + \bar{c}_{p\beta} (\widetilde{Y_{\beta} T} - \tilde{Y}_{\beta} \tilde{T}), \quad (3.25)$$

$$\bar{p} = \bar{\rho} \bar{R} \sum_{\beta=1}^{N_{\beta}} \frac{1}{\mathcal{M}_{\beta}} [\tilde{Y}_{\beta} \tilde{T} + (\widetilde{Y_{\beta} T} - \tilde{Y}_{\beta} \tilde{T})]. \quad (3.26)$$

Für kleine Wärmefreisetzungen ist $(\widetilde{Y_{\beta} T} - \tilde{Y}_{\beta} \tilde{T})$ zu vernachlässigen [158], so dass sich folgende Gleichungen zur Auswertung der Mischungstemperatur und -dichte ergeben:

$$\tilde{h} = \sum_{\beta=1}^{N_{\beta}} \tilde{Y}_{\beta} \tilde{h}_{\beta 0} + \bar{c}_{p\beta} \tilde{Y}_{\beta} \tilde{T}, \quad (3.27)$$

$$\bar{p} = \bar{\rho} \bar{R} \sum_{\beta=1}^{N_{\beta}} \frac{\tilde{Y}_{\beta} \tilde{T}}{\mathcal{M}_{\beta}}. \quad (3.28)$$

Für die Gleichung der spezifischen Wärmekapazität (2.28) ergibt sich

$$\tilde{c}_p = \sum_{\beta=1}^{N_{\beta}} \tilde{Y}_{\beta} \tilde{c}_{p,\beta}. \quad (3.29)$$

3.1.2 Modellierung der vektoriellen Feinstrukturspannungen - Wirbelviskositätsansatz

Die meisten Feinstrukturmodelle basieren auf dem Wirbelviskositätsansatz, bei dem die Feinstrukturspannungen T_{ij}^{sgs} durch den Deformationsgeschwindigkeitstensor \tilde{S}_{ij} der aufgelösten Skalen ausgedrückt werden

$$T_{ij}^{\text{sgs}} - \frac{1}{3} T_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij} \approx \nu_t \left[2\tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right]. \quad (3.30)$$

Der Deformationsgeschwindigkeitstensor \tilde{S}_{ij} schreibt sich

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right). \quad (3.31)$$

Die Feinstrukturspannungen werden somit durch eine um die turbulente Viskosität erhöhte, sogenannte effektive Viskosität

$$\nu_{\text{eff.}} = \tilde{\nu} + \nu_t \quad (3.32)$$

modelliert. Der Modellansatz nach Gl. (3.30) hat die Spur Null, entsprechend tritt die Spur von T_{ij}^{sgs} in der gefilterten Navier-Stokes-Gleichung (3.18) mit der gleichen Struktur wie der Druck auf und wird deshalb zu einem Druckparameter \bar{P}

$$\bar{P} = \bar{p} - \frac{\bar{\rho}}{3} T_{kk}^{\text{sgs}} \quad (3.33)$$

zusammengefasst. Dies muss bei einer Auswertung und Interpretation der Größe \bar{P} berücksichtigt werden. Aus kinematischen Gründen steht im zweiten Term auf der rechten Seite von Gl. (3.33) die Feinstrukturenergie $k^{\text{sgs}} = 0,5 T_{kk}^{\text{sgs}}$.

3.1.2.1 Smagorinsky-Modell

Hinsichtlich der Berechnung der turbulenten Viskosität ν_t existieren in der Literatur unterschiedliche Ansätze. Aufgrund seiner einfachen Handhabung und des geringen Rechenaufwands wird der Vorschlag von Smagorinsky [173] vielfach verwendet. Hier wird die turbulente Viskosität ν_t in Abhängigkeit von der Filterweite $\bar{\Delta}$ und der Norm des Deformationsgeschwindigkeitstensors $|\tilde{S}|$ bestimmt,

$$\nu_t = (C_s \bar{\Delta})^2 |\tilde{S}|, \quad |\tilde{S}| = \sqrt{2\tilde{S}_{lk}\tilde{S}_{lk}}. \quad (3.34)$$

Dieser Ansatz ist aus der Modellierung der Reynoldsspannungen unter dem Namen Prandtl'scher Mischungswegansatz bekannt (vergl. Kapitel 2.2.3.2) und folgt der Terminologie als Nullgleichungsmodell. Für den Modellparameter C_s (Smagorinsky-Konstante) folgt in der Literatur ein großer Wertebereich. Für eine homogene, isotrope Turbulenz folgt nach einigen analytischen Betrachtungen der Wert $C_s = 0,173$ [213]. Für Rohr- und Kanalströmungen ist ein $C_s = 0,1$ gebräuchlich. Weinberger [213] verwendet für die Simulation von Freistrahlen $C_s = 0,075$. Dies

macht deutlich, dass ein gravierender Nachteil dieses Modells die Anpassung der Smagorinsky-Konstanten an den Typ der jeweilig betrachteten Strömung ist. Zudem verschwindet der Beitrag des Turbulenzmodells für den Fall einer laminaren Strömung nicht. Insbesondere wirkt das Modell rein dissipativ, d.h. turbulente kinetische Energie wird ausschließlich von den großen zu den kleinen Skalen der Turbulenz transportiert. Dies steht im Gegensatz zu der Beobachtung, dass Energie vorübergehend auch von den kleinen zu den großen Skalen transportiert werden kann [138].

3.1.2.2 Yoshizawa-Modell

Ein zweiter Ansatz, die turbulente Viskosität im Rahmen des Wirbelviskositätsansatzes zu berechnen, wurde von Yoshizawa [221] vorgeschlagen:

$$\nu_t = (C_k \bar{\Delta}) \sqrt{k^{\text{sgs}}} \quad (3.35)$$

Voraussetzung für die Anwendung dieses Modells ist die Kenntnis der lokalen Verteilung der Feinstrukturenergie k^{sgs} . In [50] ist die Transportgleichung für die Energie der kleinen Skalen, $k^{\text{sgs}} = 1/2 (\tilde{u}_i \tilde{u}_i - \widetilde{u_i u_i})$ im Falle einer Einphasenströmung wie folgt dargestellt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k^{\text{sgs}}) + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} k^{\text{sgs}} \tilde{u}_j)}_I = & - \underbrace{\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} \left(\frac{1}{2} \tilde{u}_i \tilde{u}_i u'_j + \tilde{u}_i u'_i u'_j + \frac{1}{2} u'_i u'_i u'_j \right)}_{II} \\ & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\widetilde{u_j p} - \tilde{u}_j \tilde{p})}_{III} + \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\nu} \frac{\partial^2 k^{\text{sgs}}}{\partial x_j \partial x_i}}_{IV} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i T_{ij}^{\text{sgs}})}_V \\ & - \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\nu} \left(\widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right)}_{VI} + \underbrace{\bar{\rho} T_{ij}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}}_{VII}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

I Konvektion

II Turbulenter Transport

III Turbulenter Transport durch Druckkräfte

IV Molekularer Transport

V Turbulenter Transport durch Feinstrukturspannungen

VI Dissipation

VII Produktion

Aufgrund der Unzugänglichkeit verschiedener Terme muss Gl. (3.36) modelliert werden. Die molekularen und turbulenten Transportterme werden mit einem Gradientendiffusionsansatz modelliert [213]

$$II + III + IV + V = \frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \frac{\partial^2 k^{sgs}}{\partial x_j \partial x_j}. \quad (3.37)$$

Die Abschätzung des Dissipationsterms [213],

$$VI = C_\epsilon \bar{\rho} \frac{(k^{sgs})^{\frac{3}{2}}}{\Delta}, \quad (3.38)$$

basiert auf dem Gleichgewicht von Produktion und Dissipation von Feinstrukturenergie, welche man in stationären, homogenen Scherströmungen vorfindet. Der Produktionsterm in Gl. (3.36) bedarf keiner Modellierung, da er mit Gl. (3.30) und Gl. (3.35) geschlossen ist. Im statistischen Mittel ist er positiv und beschreibt den Zufluss kinetischer Energie aus den großen Skalen. Man erhält schließlich unter Berücksichtigung des Partikelquellterms $\bar{S}_{k^{sgs}}$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k^{sgs}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} k^{sgs} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \frac{\partial k^{sgs}}{\partial x_j} \right) + \bar{\rho} T_{ij}^{sgs} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_\epsilon \bar{\rho} \frac{(k^{sgs})^{\frac{3}{2}}}{\Delta} + \bar{S}_{k^{sgs}}. \quad (3.39)$$

Da der Ansatz von Yoshizawa dieser zusätzlichen Transportgleichung bedarf, spricht man von einem Eingleichungsmodell. Vorteilhaft ist gegenüber dem Smagorinsky-Ansatz, dass dieses Modell keinen Beitrag in laminaren Bereichen der Strömung liefert. Mit der Wahl der Konstanten C_k , C_ϵ und Pr_t ist die Gleichung (3.36) geschlossen. Um einen objektiven Vergleich zwischen dem Smagorinsky- und dem Yoshizawa-Modell zu gewährleisten, sollten die Konstanten des Eingleichungsmodells so gewählt werden, dass sich näherungsweise die im Smagorinsky-Ansatz verwendete Konstante ergibt. Menon et al. [118] geben für die Berechnung einer isotropen Turbulenz hierfür

$$C_k = 0,09, \quad C_\epsilon = 0,916, \quad Pr_t = 1,0, \quad (3.40)$$

was nach einer Überführung der Modellierung nach Yoshizawa in das Smagorinsky-Modell über den Ansatz $VII = VI$ zu einem $C_s = 0,17$ führt.

3.1.2.3 Dynamische Methoden

Smagorinsky-Modell

Um die Abhängigkeit des Feinstrukturmodells von einer Konstanten zu überwinden, schlug Germano [57] vor, den Modellparameter C_s des Smagorinsky-Modells aus den aufgelösten Geschwindigkeitsschwankungen zu berechnen. Diese Methode ist auch auf das Yoshizawa-Modell zur dynamischen Bestimmung der Konstanten C_k übertragbar. Im Folgenden Abschnitt wird die Methode von Germano anhand des Smagorinsky-Modells verdeutlicht, und im Anschluss daran die Anpassung der Methode für das Eingleichungsmodell gegeben.

Der Kern der Germano-Methode besteht darin, die aufgelöste Grobstruktur ein zweites Mal zu filtern. Der gesuchte Modellparameter wird dann so bestimmt, dass die modellierten Feinstrukturspannungen der doppelt gefilterten Größen genau die Summe aus aufgelösten und modellierten Spannungen der einfach gefilterten Größen sind. Es wird ein Testfilter eingeführt und auf einfach gefilterte Größen angewendet. Der resultierende, doppelte Filter $\hat{\Delta}$ habe eine um den Faktor α_Δ größere Filterweite als der Feinstrukturfilter $\bar{\Delta}$.

$$\hat{\Delta} = \alpha_\Delta \cdot \bar{\Delta}. \quad (3.41)$$

α_Δ nimmt hierbei den Wert 2 an. Die Feinstrukturanteile für Normal- und Testfilterung lassen sich darstellen als

$$\widetilde{u_i u_j} = \tilde{u}_i \tilde{u}_j - T_{ij}^{\text{sgs}}, \quad (3.42)$$

$$\widehat{u_i u_j} = \hat{u}_i \hat{u}_j - T_{ij}^{\text{Test}}. \quad (3.43)$$

Filtert man den regulären Feinstrukturanteil in Gl. (3.42) mit dem Testfilter, erhält man mit Gl. (3.43) die sogenannte Germano-Identität, beziehungsweise die Leonard-Spannungen [99]:

$$L_{ij} := \widehat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j = \widehat{T_{ij}^{\text{sgs}}} - T_{ij}^{\text{Test}} \quad (3.44)$$

In den Leonard-Spannungen sind keine unbekannten Terme mehr enthalten. Die Tensoren der Feinstrukturspannungen werden mit dem Modell von Smagorinsky modelliert:

$$T_{ij}^{\text{sgs}} - \frac{1}{3} T_{kk}^{\text{sgs}} \delta_{ij} \approx 2 C \bar{\Delta}^2 |\tilde{S}| \left[\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right] =: 2 C m_{ij}^{\text{sgs}} \quad (3.45)$$

$$T_{ij}^{\text{Test}} - \frac{1}{3} T_{kk}^{\text{Test}} \delta_{ij} \approx 2 C \hat{\Delta}^2 |\hat{S}| \left[\hat{S}_{ij} - \frac{1}{3} \hat{S}_{kk} \delta_{ij} \right] =: 2 C m_{ij}^{\text{Test}} \quad (3.46)$$

Der Parameter C entspricht dem Quadrat der Smagorinsky-Konstanten C_s :

$$C = C_s^2 \quad (3.47)$$

Aufgrund der Annahme, dass der Germano-Parameter invariant gegenüber der Testfilterung ist

$$\widehat{C\psi} \approx C\hat{\psi}, \quad (3.48)$$

führt dies zu einer modifizierten Form von Gl.(3.44)

$$2 C \widehat{m_{ij}^{\text{sgs}}} - 2 C m_{ij}^{\text{Test}} = \widehat{\tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \hat{u}_i \hat{u}_j - \frac{1}{3} \left(\widehat{T_{ij}^{\text{sgs}}} - T_{ij}^{\text{Test}} \right) \delta_{ij}. \quad (3.49)$$

Unter Nutzung der Definition

$$M_{ij} := \widehat{m_{ij}^{\text{sgs}}} - m_{ij}^{\text{Test}} \quad (3.50)$$

erhält man schließlich ein Gleichungssystem zur Bestimmung des Parameters C :

$$2 C M_{ij} = L_{ij} - \frac{1}{3} L_{kk} \delta_{ij} \quad (3.51)$$

Gl. (3.51) stellt ein Gleichungssystem von fünf unabhängigen Gleichungen dar. Um dieses zu lösen, schlug Germano eine Kontraktion mit dem Deformationsgeschwindigkeitstensor \tilde{S}_{ij} vor:

$$C = \frac{L_{ij}\tilde{S}_{ij}}{2M_{ij}\tilde{S}_{ij}} \quad (3.52)$$

Diese Vorgehensweise kann jedoch zu numerischen Instabilitäten führen, so dass im Rahmen dieser Arbeit eine Erweiterung von Lilly [103] verwandt wurde. Danach ergibt sich der Parameter C über eine Fehlerquadratminimierung. Die Berechnung von C ergibt

$$C = \frac{L_{ij}M_{ij}}{2M_{ij}^2}. \quad (3.53)$$

In Gl. (3.53) taucht der isotrope Anteil in Gl. (3.51) nicht mehr auf, da $\tilde{S}_{ii} = 0$ für inkompressible Strömungen gilt (vgl. Gl. (3.61)). Eine direkte Verwendung der Beziehung (3.53) hat im Allgemeinen numerische Probleme zur Folge, da die Schwankung von C deutlich größer sein kann als sein Mittelwert. Lokal wird C teilweise negativ, was zu einer negativen effektiven Viskosität in Gleichung (3.32) führt. Um dies zu verhindern, besteht die Möglichkeit Zähler und Nenner in der Gl. (3.53) über homogene Richtungen zu mitteln. Solche Mittelungen sind jedoch für Simulationen komplexer Geometrien nicht praktikabel, so dass im Rahmen dieser Arbeit negative Werte für C auf Null gesetzt wurden¹⁾. Die Germano-Konstante berechnet sich somit zu

$$C_{\text{Germ}} = \max \left\{ \frac{L_{ij}M_{ij}}{2M_{ij}^2}, 0 \right\}. \quad (3.54)$$

Durch das Verhindern von negativen Werten wird C leicht erhöht, was jedoch aufgrund der leichten Implementierung in Kauf genommen wird. Die turbulente Viskosität wird somit im Rahmen des Smagorinsky-Modells wie folgt beschrieben:

$$\nu_t = C_{\text{Germ}} \cdot \bar{\Delta}^2 |\tilde{S}| \quad (3.55)$$

Eingleichungs-Modell

Die Anwendung der dynamischen Prozedur auf das Feinstrukturmodell nach Yoshizawa ergibt im Prinzip eine analoge Vorgehensweise. Basierend auf der Spur von Gl. (3.44) definiert sich zunächst die turbulente kinetische Energie auf Testfilterniveau:

$$K := L_{ii}/2 + \hat{k}^{\text{sgs}} \quad (3.56)$$

Mit der Modellierung der Tensoren der Feinstrukturspannungen auf beiden Filterebenen mit dem Yoshizawa-Modell

$$T_{ij}^{\text{sgs}} - \frac{1}{3}T_{kk}^{\text{sgs}}\delta_{ij} \approx 2C\bar{\Delta}\sqrt{k^{\text{sgs}}} \left[\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk}\delta_{ij} \right] =: 2Cm_{ij}^{\text{sgs}}, \quad (3.57)$$

$$T_{ij}^{\text{Test}} - \frac{1}{3}T_{kk}^{\text{Test}}\delta_{ij} \approx 2C\hat{\Delta}\sqrt{K} \left[\hat{S}_{ij} - \frac{1}{3}\hat{S}_{kk}\delta_{ij} \right] =: 2Cm_{ij}^{\text{Test}}, \quad (3.58)$$

¹⁾engl.: clipping

und der analogen Vorgehensweise erhält man schließlich die identische Gleichung (3.53) zur Bestimmung der Modellkonstanten C , für die

$$C = C_k \quad (3.59)$$

gilt. Für das Eingleichungsmodell ergibt sich die turbulente Viskosität aus

$$\nu_t = C_{\text{Germ}} \cdot \bar{\Delta} \sqrt{k^{\text{sgs}}}. \quad (3.60)$$

Im Rahmen der Anwendung des Eingleichungsmodells basierend auf der dynamischen Methode wird der Argumentation von Piomelli et al. [138] gefolgt und der momentan stattfindende Rückfluss an Energie von der Feinstruktur zu der Grobstruktur²⁾ durch das Zulassen einer teilweisen negativen Viskosität im Produktionsterm (VII) in Gl. (3.39) beschrieben. Zur Abbildung dieser Effekte wird er in folgender Form beschrieben [86]:

$$\bar{\rho} T_{ij}^{\text{sgs}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} = 2 \bar{\rho} \nu^{\text{sgs}} \left[\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right] \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3.61)$$

ν^{sgs} definiert sich hierbei nach Gl. (3.35), jedoch darf die Konstante C_k negativ sein. Damit ist der Charakter des Modells nicht mehr rein dissipativ wie der des Smagorinsky-Modells. Somit ergibt sich

$$C^{\text{sgs}} = \frac{L_{ij} M_{ij}}{2 M_{ij}^2}, \quad (3.62)$$

$$\nu^{\text{sgs}} = C^{\text{sgs}} \cdot \bar{\Delta} \sqrt{k^{\text{sgs}}}. \quad (3.63)$$

Da der Diffusionsterm in Gl. (3.39) weiterhin eine positive turbulente Viskosität ν_t hat, ist die numerische Stabilität des Verfahrens gewährleistet.

Die Konstante der Dissipationsrate C_ϵ in Gl. (3.39) wird mit einem Verfahren von Kim & Menon [77] bestimmt. Ähnlich der Definition der Leonard-Spannungen (3.44) ergibt sich mit der auf dem normalen Filterniveau gegebenen Dissipationsrate ϵ und der auf dem Testfilterniveau definierten Dissipationsrate E

$$\epsilon = \nu_{\text{eff.}} \left(\widehat{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right), \quad (3.64)$$

$$E = \nu_{\text{eff.}} \left(\widehat{\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial \hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j} \right), \quad (3.65)$$

eine Identität F

$$F = E - \hat{\epsilon} = \nu_{\text{eff.}} \left(\widehat{\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial \hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j} \frac{\partial \hat{\tilde{u}}_i}{\partial x_j} \right), \quad (3.66)$$

²⁾engl.: effect of „backscattering“

welche für die dynamische Bestimmung von C_ϵ über

$$F = C_\epsilon G, \quad (3.67)$$

verwendet wird, wobei

$$G = \left[\frac{K^{\frac{3}{2}}}{\hat{\Delta}} - \frac{\widehat{(k^{sgs})^{\frac{3}{2}}}}{\bar{\Delta}} \right] \quad (3.68)$$

ist. Somit bestimmt sich C_ϵ als einzige Unbekannte in Gl. (3.67) ohne Verwendung der Fehlerquadratminimierung zu

$$C_\epsilon = \frac{F}{G}. \quad (3.69)$$

3.1.3 Modellierung der skalaren Feinstrukturspannungen - Wirbeldiffusitätsansatz

Zur Schließung der Gleichungen (3.19) und (3.20) wird ein Gradientenflussansatz³⁾ [159] zur Modellierung von Y^{sgs} , beziehungsweise h^{sgs} verwendet:

$$Y^{sgs} = \frac{\bar{\rho}\nu_t}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \right) \quad (3.70)$$

$$h^{sgs} = \frac{\bar{\rho}\nu_t}{Pr_t} \left(\frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \right) \quad (3.71)$$

In den Gl. (3.70) und (3.71) bestimmt sich die turbulente Viskosität ν_t aus den in den vorigen Abschnitten beschriebenen Modellierungsansätzen für die Feinstrukturspannungen T_{ij}^{sgs} . Die turbulente Schmidt-Zahl Sc_t wird im Rahmen dieser Arbeit zu 0,7 gesetzt, die turbulente Prandtl-Zahl Pr_t zu 1,0 [159].

Der Einfluss der Modellierung mit einer konstanten turbulenten Schmidt-Zahl Sc_t wurde in der Fachliteratur beschrieben [123]. Um hier unabhängig von einer Konstanten zu verbleiben, kann gleichfalls wie für die Feinstrukturspannungen T_{ij}^{sgs} auf dynamische Prozeduren zurückgegriffen werden [123]. Im Rahmen dieser Arbeit findet die Skalar-Modellierung, wie in den Gleichungen (3.70) und (3.71) dargestellt, Verwendung.

Mit den beschriebenen Modellierungsansätzen in Kapitel 3.1.2 - 3.1.3 ist das Gleichungssystem (3.17) - (3.20) in sich geschlossen und kann somit einer Lösung zugeführt werden.

3.2 Numerisches Lösungsverfahren

Die Gleichungen (3.17) - (3.20) beschreiben den Massen-, Impuls- und Energieerhalt eines Mehrphasensystems. Es handelt sich dabei um ein System gekoppelter, nichtlinearer und partieller Differentialgleichungen, welches im Allgemeinen nicht analytisch gelöst werden kann.

³⁾engl.: eddy diffusivity approach

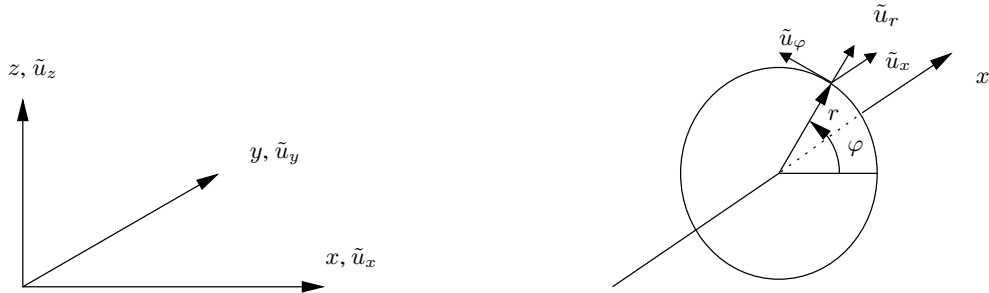


Abbildung 3.2: Koordinatensysteme

Man greift daher auf numerische Lösungsmethoden zurück. Das folgende Kapitel beschreibt die räumliche Diskretisierung und zeitliche Integration der das Euler'sche Fluid beschreibenden Differentialgleichungen.

3.2.1 Verwendete Koordinatensysteme

Bisher wurden alle Transportgleichungen in kartesischen Koordinaten formuliert. Die Geometrie einer Drallströmung, wie sie in Kapitel 6 beschrieben ist, lässt sich so jedoch nicht sinnvoll abbilden, sondern erfordert ein zylindrisches Koordinatensystem. Die Krümmung der Koordinatenachsen führt zu entsprechend veränderten Gleichungen. Um eine weitgehend gemeinsame Schreibweise in kartesischem und zylindrischem Koordinatensystem zu ermöglichen, wird der Beschreibung von Forkel [47] gefolgt und alle Geschwindigkeitskomponenten in zylindrischen Koordinaten als Bahngeschwindigkeiten definiert, d.h. u_φ ist nicht die Winkelgeschwindigkeit sondern hat die Einheit Meter pro Sekunde wie die anderen Komponenten auch. Die Ortskoordinate in Umfangsrichtung ist der Winkel gemessen im Bogenmaß. Abbildung 3.2 zeigt die Anordnung der Größen in den beiden Koordinatensystemen. Im Rahmen der räumlichen Diskretisierung muss festgelegt werden, welche Größen an welchen Positionen eines Diskretisierungsgitters abgespeichert werden. Als Berechnungsgrößen dienen hier der gefilterte Druckparameter \bar{P} , die drei gefilterten Komponenten \tilde{u}_i der Geschwindigkeit, der gefilterte Massenbruch \tilde{Y} und die gefilterte Enthalpie \tilde{h} . Die anderen in den Gleichungen auftretenden Skalare $\bar{\rho}$ und \tilde{v} sind Funktionen des Massenbruchs des verdampfenden Stoffes und der Enthalpie und werden, wie in Kapitel 2.2.2 formuliert, ausgewertet.

Die Diskretisierung des Rechengebiets erfolgt auf einem versetzten Gitter (*staggered grid*) nach Harlow und Welch [67]. Ausgehend von einem geeignet gewählten Gitter werden die Skalare \bar{P} , \tilde{Y} und \tilde{h} in den Mittelpunkten der Gitterzellen (auch Masche genannt) positioniert, die Geschwindigkeitskomponenten dagegen jeweils in der Mitte der in Wirkrichtung versetzten Seitenwände (Abb. 3.3). Diese Anordnung verhindert eine Entkopplung der Druckwerte benachbarter Zellen. Bei einer Anordnung der Geschwindigkeitskomponenten in den Zellmittelpunkten müsste die Kopplung durch zusätzliche Maßnahmen hergestellt werden. Folge einer solchen

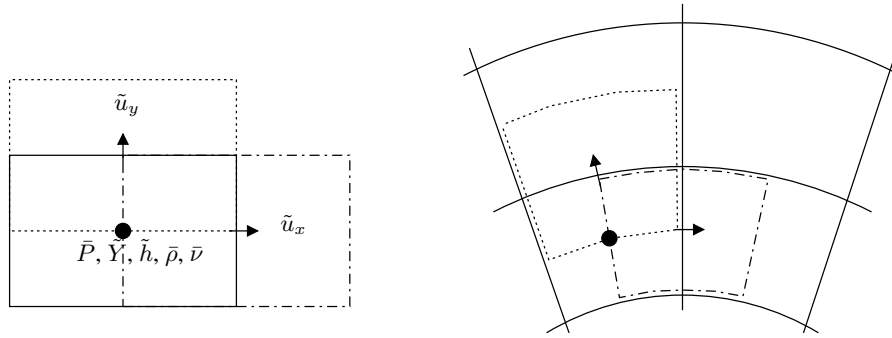


Abbildung 3.3: Versetzte Gitter

Entkopplung sind nicht-physikalische, räumliche Druckoszillationen, die von den Schwankungen des Feldes nicht mehr unterschieden werden können. Durch die gewählte Anordnung ist sichergestellt, dass die Filterung der Geschwindigkeitskomponenten über Zellen erfolgt, die gegenüber dem Ausgangsgitter versetzt sind. Gleiches gilt für die Kontrollvolumina eines Finite-Volumen-Verfahrens. Wie in Abbildung 3.3 dargestellt, sind die Seitenflächen dieser versetzten Zellen entweder deckungsgleich mit Teilen der Wände der Ausgangszellen oder verlaufen durch die Mittelpunkte der Ausgangszellen.

3.2.2 Räumliche Diskretisierung der Differentialgleichungen

Im Rahmen der numerischen Lösung führt man die Differentialgleichungen mittels einer räumlichen Diskretisierung in algebraische Gleichungen über. Für die räumliche Diskretisierung der gekoppelten, nichtlinearen sowie partiellen Differentialgleichungen wird die Methode der finiten Volumen gewählt. Diese Methode beruht darauf, das Rechengebiet in einzelne Maschenvolumina einzuteilen und über diese die Volumenintegration der Erhaltungsgleichungen auszuführen. Aus der differentiellen Form der Erhaltungsgleichungen resultiert die integrale Form. Unter der Verwendung des Gauß'schen Integralsatzes

$$\iiint_{\Delta V} \operatorname{div} \vec{\psi} dV = \iint_{\Delta A} (\vec{\psi} \cdot \vec{n}) dA \quad (3.72)$$

und der Berücksichtigung, dass im Rahmen der integralen Mittelwertbildung über das jeweilige Gebiet Volumen- und Flächenmittelwerte einer Größe ψ den gleichen Gebietsschwerpunkt haben, d.h. es gilt

$$\bar{\psi} = \overline{\psi}^{\Delta V} \approx \overline{\psi}^{\Delta A_i} \approx \overline{\psi}^{\Delta A_j}, \quad (3.73)$$

und unter Einbezug der mit einem Feinstrukturmodell modellierten Konvektionsterme in Kapitel 3.1.2 erhält man das zu den Erhaltungsgleichungen (3.17) - (3.20) korrespondierende System

der Flussbilanzen:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{1}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left(|\Delta A_j^+| \bar{\rho} \tilde{u}_j - |\Delta A_j^-| \bar{\rho} \tilde{u}_j \right) = \bar{S}_\rho \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = \frac{1}{|\Delta V|} \left\{ \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\bar{\rho} \nu_{\text{eff}} \tilde{D}_{ij} - (\bar{\rho} \tilde{u}_i) \tilde{u}_j \right) \right. \right. \\ \left. \left. - |\Delta A_j^-| \left(\bar{\rho} \nu_{\text{eff}} \tilde{D}_{ij} - (\bar{\rho} \tilde{u}_i) \tilde{u}_j \right) \right] \right. \\ \left. - (|\Delta A_i^+| \bar{P} - |\Delta A_i^-| \bar{P}) + |\Delta V| \bar{\rho} g_i + Q_i \right\} + \bar{S}_{u_i}, \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}) = \frac{1}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho} \nu_{\text{eff}}}{(S_c + S_{c_t})} \tilde{\theta}_j - (\bar{\rho} \tilde{Y}) \tilde{u}_j \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho} \nu_{\text{eff}}}{(S_c + S_{c_t})} \tilde{\theta}_j - (\bar{\rho} \tilde{Y}) \tilde{u}_j \right) \right] + \bar{S}_\rho, \end{aligned} \quad (3.76)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) = \frac{1}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{\nu}}{Pr} \tilde{q}_j + \frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \tilde{\theta}_j - (\bar{\rho} \tilde{h}) \tilde{u}_j \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho} \tilde{\nu}}{Pr} \tilde{q}_j + \frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \tilde{\theta}_j - (\bar{\rho} \tilde{h}) \tilde{u}_j \right) \right] + \bar{S}_h. \end{aligned} \quad (3.77)$$

Die modellierte Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie der Feinstruktur schreibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} k^{\text{sgs}}) = \frac{1}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \tilde{\theta}_j - (\bar{\rho} k^{\text{sgs}}) \tilde{u}_j \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \tilde{\theta}_j - (\bar{\rho} k^{\text{sgs}}) \tilde{u}_j \right) \right] \\ + \bar{\rho} \nu^{\text{sgs}} \tilde{D}_{ij} \tilde{\Phi}_{ij} - C_\epsilon \frac{(\bar{\rho} k^{\text{sgs}})^{\frac{3}{2}}}{\bar{\Delta}} + \bar{S}_{k^{\text{sgs}}}. \end{aligned} \quad (3.78)$$

ΔV bezeichnet hierbei das den zu berechnenden Größen zugrunde liegende Kontrollvolumen, ΔA_j^+ und ΔA_j^- die in positiver, beziehungsweise in negativer Wirkrichtung der Komponente j versetzten Wände des Kontrollvolumens. Der Term Q_i beinhaltet alle Quellen, die aus der Krümmung der Koordinatenachsen entstehen (Forkel [47]). Der Diffusionsterm

$$\tilde{D}_{ij} = \tilde{D}_{ji} = 2\tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3}\tilde{S}_{kk}\delta_{ij} \quad (3.79a)$$

hängt vom Tensor \tilde{S} der Deformationsgeschwindigkeiten ab. In kartesischen Koordinaten schreibt sich \tilde{S}_{ij} nach Gl. (3.31), in zylindrischen Koordinaten erhält man

$$\tilde{S}^{\text{zyl}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} & \frac{1}{r}\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial \varphi} + r\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r}\right) & \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial x} \\ \frac{1}{r}\frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial \varphi} + r\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r}\right) & 2\left(\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r}\right) + \frac{\tilde{u}_r}{r}\right) & r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial r} + \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial x} & r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial \varphi} & 2\frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial r} \end{pmatrix}. \quad (3.80a)$$

Der Wärmeflussvektor \tilde{q}_j ist in kartesischen Koordinaten

$$\tilde{q}_j^{\text{kart}} = \tilde{c}_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{\beta} \tilde{h}_{\beta} \frac{\partial \tilde{Y}_{\beta}}{\partial x_j} \quad (3.81a)$$

beziehungsweise in zylindrischen Koordinaten

$$\tilde{q}_1^{\text{zyl}} = \tilde{c}_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + \sum_{\beta} \tilde{h}_{\beta} \frac{\partial \tilde{Y}_{\beta}}{\partial x}, \quad \tilde{q}_2^{\text{zyl}} = \tilde{c}_p \frac{\partial \tilde{T}}{r \partial \varphi} + \sum_{\beta} \tilde{h}_{\beta} \frac{\partial \tilde{Y}_{\beta}}{r \partial \varphi}, \quad \tilde{q}_3^{\text{zyl}} = \tilde{c}_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial r} + \sum_{\beta} \tilde{h}_{\beta} \frac{\partial \tilde{Y}_{\beta}}{\partial r} \quad (3.81b)$$

Der Ausdruck $\tilde{\theta}_j$ ist der Gradient des jeweiligen Skalars

$$\tilde{\theta}_j^{\text{kart}} = \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial x_j}, \quad (3.82a)$$

beziehungsweise im zylindrischen System

$$\tilde{\theta}_1^{\text{zyl}} = \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial x}, \quad \tilde{\theta}_2^{\text{zyl}} = \frac{1}{r} \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial \varphi}, \quad \tilde{\theta}_3^{\text{zyl}} = \frac{\partial \tilde{\zeta}}{\partial r}. \quad (3.82b)$$

Der Skalar $\tilde{\zeta}$ bezeichnet in der Transportgleichung (3.76) den Massenbruch des verdampfenden Stoffes \tilde{Y} , in Gl. (3.77) \tilde{h} und in Gl. (3.78) k^{sgs} .

Der Ausdruck $\tilde{\Phi}_{ij}$ ist der Gradient der Geschwindigkeitskomponente

$$\tilde{\Phi}_{ij}^{\text{kart}} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (3.83a)$$

beziehungsweise im zylindrischen System

$$\tilde{\Phi}^{\text{zyl}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial x} & \frac{1}{r} \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial \varphi} & \frac{\partial \tilde{u}_x}{\partial r} \\ r \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r} \right) & \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r} \right) + \frac{\tilde{u}_r}{r} & r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\tilde{u}_\varphi}{r} \right) \\ \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial x} & \frac{1}{r} \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial \varphi} & \frac{\partial \tilde{u}_r}{\partial r} \end{pmatrix}. \quad (3.84a)$$

Damit sind alle Terme auf die Berechnungsgrößen und deren Ableitungen zurückgeführt. Der letzte Schritt innerhalb der räumlichen Diskretisierung besteht in der Approximation der auf den

Seitenflächen gesuchten Werten mit Werten an gespeicherten Positionen des zugrunde liegenden Maschengitters. Eine detaillierte Beschreibung dessen findet sich bei Schmitt [164], Weinberger [213] und bei Kempf [75], so dass hier nur die grundlegenden Prinzipien in Stichworten genannt werden:

- Konvektive Terme:
 - Transportierte Größe ($\bar{\rho}\tilde{u}_i$) in der Navier-Stokes Gleichung:
Interpolation durch Polynom 3. Grades
 - Transportierte Skalare ($\bar{\rho}\tilde{\zeta}$):
Um die bei dem Transport mittels zentraler Differenzen beobachteten Oszillationen zu hemmen und die numerische Diffusion gering zu halten, wird im Rahmen des konvektiven Skalartransports das sogenannte⁴⁾ „TVD“-Verfahren mit einer nicht-linearen CHARM-Limitierung verwendet.
- Diffusive Terme:
Ableitungen in der Mitte zwischen zwei gespeicherten Werten: zentrale Differenzen
- Sonstige Interpolationen: Volumengewichtet aus den beiden Nachbarzellen, z. B.

$$\bar{\rho}_{i,k+\frac{1}{2}} = \frac{|\Delta V^-| \cdot \bar{\rho}_k + |\Delta V^+| \cdot \bar{\rho}_{k+1}}{|\Delta V^-| + |\Delta V^+|}. \quad (3.85)$$

Diese Vorgehensweise berücksichtigt, dass es sich bei den Größen um Mittelwerte über Zellen handelt.

- Sonstige Ableitungen: Interpolation durch Parabel, anschließende Ableitung. Gewichtung *upwind* / *downwind* zu je 50% → zentrales Verfahren

3.2.3 Zeitintegration der Transportgleichungen

Die im vorigen Kapitel dargestellte räumliche Diskretisierung führt zu einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen, welches in der allgemeinen Form

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = F(\psi) = K(\psi) + D(\psi) + S(\psi) \quad (3.86)$$

geschrieben wird. $K(\psi)$ beinhaltet den Konvektionsanteil, $D(\psi)$ den Diffusionsterm und $S(\psi)$ die Quellterme der dispersen Phase. Innerhalb der zeitlichen Diskretisierung wird ein betrachtetes Zeitintervall in einzelne Subintervalle, genannt Zeitschritt der Länge Δt , zerlegt. Die Lösung ψ^{n+1} des neuen Zeitschritts ergibt sich dann aufgrund der Lösung des aktuellen Zeitschritts:

$$\psi^{n+1} = \psi^n + \Delta t \cdot F^n \quad (3.87)$$

⁴⁾engl.: **T**otal **V**ariation **D**iminishing

Wenn F^n für die Zeitebene n bekannt ist, kann ψ^{n+1} explizit bestimmt werden. Dieses Schema ist als explizites Euler-Verfahren bekannt und hat einen Abbruchfehler $\mathcal{O}(\Delta t)$ erster Ordnung. Wenn der Term F in Gleichung (3.87) von der Zeitebene $n + 1$ abhängt, erhält man demgegenüber das sogenannte implizite Euler-Verfahren, das den Einsatz rechenzeitintensiver, iterativer Löser erforderlich macht. Der allgemeine Vorteil solcher impliziter Verfahren besteht in der Verwendung größerer Zeitschrittweiten. Dennoch ist auch der Zeitschritt impliziter Verfahren letztlich dadurch begrenzt, dass das typische Zeitmaß turbulenter Strömungen aufgelöst werden muss. Die Wahl eines Zeitschritts, der größer als dieses Zeitmaß ist, kann zur Folge haben, dass die turbulenten Fluktuationen vollständig weggedämpft werden. Da dadurch der Vorteil des unbeschränkten Zeitschritts mit einem impliziten Verfahren nicht mehr gegeben ist, wird im Rahmen dieser Arbeit somit ein explizites, dreistufiges Runge-Kutta Verfahren nach Williamson [215] verwendet,

$$\begin{aligned}\psi^{(1)} &= \psi^n + \Delta t \cdot [\gamma_1 F^n] \\ \psi^{(2)} &= \psi^{(1)} + \Delta t \cdot [\gamma_2 F^{(1)} + \xi_2 F^n] \\ \psi^{n+1} &= \psi^{(2)} + \Delta t \cdot [\gamma_3 F^{(2)} + \xi_3 (F^{(1)} + \frac{\xi_2}{\gamma_2} F^n)],\end{aligned}\tag{3.88}$$

welches einen Abbruchfehler $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ dritter Ordnung und eine Zeitschrittweite

$$\Delta t^{\text{RK}} \leq 0,7 \left(\frac{\Delta x_i}{|\tilde{u}_i|} \right)_{\min}\tag{3.89}$$

hat. Die Koeffizienten des Runge-Kutta Verfahrens lauten

$$\gamma_1 = \frac{1}{3}, \quad \gamma_2 = \frac{15}{16}, \quad \xi_2 = -\frac{75}{144}, \quad \gamma_3 = \frac{8}{15}, \quad \xi_3 = -\frac{51}{81}.$$

Die Teilschrittweiten der einzelnen Stufen betragen, bezogen auf die Weite Δt des Gesamtschritts,

$$\Delta t^{(1)} = \frac{1}{3} \Delta t, \quad \Delta t^{(2)} = \frac{5}{12} \Delta t, \quad \Delta t^{(3)} = \frac{1}{4} \Delta t.$$

Auf jeder der drei Integrationsstufen erfordert dieses Verfahren eine Auswertung der Transportgleichungen. Durch die guten Stabilitätseigenschaften und die vergleichbar größeren Zeitschrittweiten wird dieser Nachteil jedoch aufgewogen. Damit in zylindrischen Koordinaten der Anteil $(r \cdot \Delta \varphi)^2 / \nu_{\text{eff}}$ (Gl. (3.111)) für die Zeitschrittweitenbegrenzung entfallen kann und somit größere Zeitschrittweiten möglich sind, werden zusätzlich die im Diffusionsterm der Geschwindigkeiten auftretenden zweiten Ableitungen in Umfangsrichtung vollimplizit mit dem Euler-Rückwärts-Verfahren sowie für die Skalare mit Unterzeitschritten integriert.

Zur Auswertung der Transportgleichung innerhalb einer Stufe des Runge-Kutta-Verfahrens wird ein sogenanntes Predictor-Corrector-Verfahren angewendet. Der Algorithmus 3.1 beschreibt die Vorgehensweise für das Euler-Lagrange-Verfahren. Hinsichtlich einer übersichtlichen Dar-

1. Lagrange'scher Teil

- a) Bestimmung der Geschwindigkeiten $(u_i^{\text{sgs}})^n$ zur Beschreibung der Partikeldispersion
- b) Randbehandlung der Partikel und Transport der dispersen Phase (Kapitel 4.4)
- c) Bestimmung der Partikelquellterme (Kapitel 4.3.2.1)

2. Euler'scher Teil

- a) Bestimmung der turbulenten Viskosität ν_t^n im Rahmen der in Kapitel 3.1.2 beschriebenen Feinstrukturmodellierung
- b) Predictor-Schritt:
Transport von $\bar{\rho}^n$ und $(\bar{\rho}\tilde{Y}^n)$ mit dem noch unkorrigierten Geschwindigkeitsfeld $\tilde{u}_i^{n*} \Rightarrow$ Erhalt von \tilde{Y}^{n+1} und $\bar{\rho}^{n+1*}$.
Auf der Basis von \tilde{Y}^{n+1} :
 - i. Bestimmung der finalen Temperatur \tilde{T}^{n+1} (Gl. (3.27))
 - ii. Bestimmung der Ziel-Dichte $\bar{\rho}^{n+1}$ (Gl. (3.28))
 - iii. Bestimmung der molekularen Viskosität $\tilde{\nu}^{n+1}$
- c) Druckkorrektur:
 - i. Bestimmung des Korrekturdrucks ϖ aus $\Delta\varpi = (\bar{\rho}^{n+1} - \bar{\rho}^{n+1*})/\Delta t$
 - ii. $\bar{P}^{n+1} = \bar{P}^n + \varpi$
 - iii. $(\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n*} - \Delta t \frac{\partial \varpi}{\partial x_i}$
- d) Corrector-Schritt:
 - i. Transport von $\bar{\rho}^n$, $(\bar{\rho}\tilde{Y})^n$, $(\bar{\rho}\tilde{h})^n$ und gegebenenfalls $(\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^n$ mit dem nun korrigierten Geschwindigkeitsfeld $\tilde{u}_i^{n+1} \Rightarrow$ Erhalt der finalen Werte für $\bar{\rho}^{n+1}$, \tilde{Y}^{n+1} , \tilde{h}^{n+1} und $(k^{\text{sgs}})^{n+1}$
 - ii. Zeitintegration der Impulsgleichungen: Vorhersage der Geschwindigkeiten \tilde{u}_i^{n+1*}
- e) Erneuerung der Randwerte gemäß Randbedingungen

Algorithmus 3.1: Eine Stufe der Zeitintegration des Runge-Kutta-Verfahrens im Rahmen des Euler-Lagrange Verfahrens

stellung wird dabei die im Folgenden beschriebene Integration innerhalb einer Stufe des Runge-Kutta-Verfahrens der Einfachheit halber anhand des expliziten Euler-Verfahrens gezeigt:

Innerhalb des Predictor-Schrittes wird die Dichte $\bar{\rho}^n$ und eine Pseudo-Partialdichte $\bar{\rho}\tilde{Y}^n$ mit dem noch unkorrigierten Geschwindigkeitsfeld \tilde{u}_i^{n*} transportiert und die angenommene Dichte $\bar{\rho}^{n+1*}$ und $(\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1}$ bestimmt

$$\bar{\rho}^{n+1*} = \bar{\rho}^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left(|\Delta A_j^+| \bar{\rho}^n \tilde{u}_j^{n*} - |\Delta A_j^-| \bar{\rho}^n \tilde{u}_j^{n*} \right) + \Delta t \bar{S}_\rho^n, \quad (3.90)$$

$$\begin{aligned} (\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{Y})^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho}^n \nu_{\text{eff}}^n}{(S_c + S_{c_t})} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}\tilde{Y})^n \tilde{u}_j^{n*} \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho}^n \nu_{\text{eff}}^n}{(S_c + S_{c_t})} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}\tilde{Y})^n \tilde{u}_j^{n*} \right) \right] + \Delta t \bar{S}_\rho^n. \end{aligned} \quad (3.91)$$

\tilde{Y}^{n+1} ergibt sich danach zu

$$\tilde{Y}^{n+1} = \frac{(\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1}}{\bar{\rho}^{n+1*}}. \quad (3.92)$$

Auf der Basis von \tilde{Y}^{n+1} bestimmt sich die Temperatur \tilde{T}^{n+1} aus Gl. (3.27) und darauf aufbauend die Ziel-Dichte des Gemisches $\bar{\rho}^{n+1}$ nach Gl. (3.28). Die Dichte $\bar{\rho}^{n+1*}$ weicht aufgrund des noch unkorrigierten Geschwindigkeitsfeldes von $\bar{\rho}^{n+1}$ ab. Die Differenz beider Werte wird nun dafür verwendet, das Geschwindigkeitsfeld und den Druckparameter \bar{P}^n so anzugleichen, dass die Kontinuitätsgleichung erfüllt wird. Mit dem Corrector-Schritt werden sodann die originalen Felder für $\bar{\rho}^n$ und $(\bar{\rho}\tilde{Y})^n$

$$\bar{\rho}^{n+1} = \bar{\rho}^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left(|\Delta A_j^+| \bar{\rho}^n \tilde{u}_j^n - |\Delta A_j^-| \bar{\rho}^n \tilde{u}_j^n \right) + \Delta t \bar{S}_\rho^n, \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned} (\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{Y})^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho}^n \nu_{\text{eff}}^n}{(S_c + S_{c_t})} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}\tilde{Y})^n \tilde{u}_j^n \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho}^n \nu_{\text{eff}}^n}{(S_c + S_{c_t})} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}\tilde{Y})^n \tilde{u}_j^n \right) \right] + \Delta t \bar{S}_\rho^n \end{aligned} \quad (3.94)$$

integriert und der Massenbruch \tilde{Y}^{n+1} aus

$$\tilde{Y}^{n+1} = \frac{(\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1}}{\bar{\rho}^{n+1}} \quad (3.95)$$

erhalten. Anschließend werden $\bar{\rho}^{n+1*}$, $(\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1}$ mit der originalen Dichte $\bar{\rho}^{n+1}$ beziehungsweise der Partialdichte $(\bar{\rho}\tilde{Y})^{n+1}$ überschrieben, so dass diese Pseudo-Größen vom aktuellen Wert

aus gemäß den Gleichungen (3.90) und (3.91) weitertransportiert werden. Im letzten Schritt des Predictor-Corrector-Verfahrens werden $(\bar{\rho}\tilde{u}_i)^n$, $(\bar{\rho}\tilde{h})^n$ und gegebenenfalls $(\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^n$ für die nächste Stufe des Runge-Kutta-Verfahrens in der Zeit integriert,

$$\begin{aligned} (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \left\{ \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\bar{\rho}^n \nu_{\text{eff}}^n \tilde{D}_{ij}^n - (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^n \tilde{u}_j^n \right) \right. \right. \\ \left. \left. - |\Delta A_j^-| \left(\bar{\rho}^n \nu_{\text{eff}}^n \tilde{D}_{ij}^n - (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^n \tilde{u}_j^n \right) \right] \right. \\ \left. - (|\Delta A_i^+| \bar{P}^n - |\Delta A_i^-| \bar{P}^n) + |\Delta V| \bar{\rho}^n g_i + Q_i \right\} + \Delta t \bar{S}_{u_i}^n, \end{aligned} \quad (3.96)$$

$$\begin{aligned} (\bar{\rho}\tilde{h})^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{h})^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho}^n \tilde{\nu}^n}{Pr} \tilde{q}_j^n + \frac{\bar{\rho}^n \nu_t^n}{Pr_t} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}\tilde{h})^n \tilde{u}_j^n \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho}^n \tilde{\nu}^n}{Pr} \tilde{q}_j^n + \frac{\bar{\rho}^n \nu_t^n}{Pr_t} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}\tilde{h})^n \tilde{u}_j^n \right) \right] + \Delta t \bar{S}_h^n, \end{aligned} \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} (\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^{n+1} = (\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^n + \frac{\Delta t}{|\Delta V|} \sum_{j=1}^3 \left[|\Delta A_j^+| \left(\frac{\bar{\rho}^n \nu_t^n}{Pr_t} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^n \tilde{u}_j^n \right) \right. \\ \left. - |\Delta A_j^-| \left(\frac{\bar{\rho}^n \nu_t^n}{Pr_t} \tilde{\theta}_j^n - (\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^n \tilde{u}_j^n \right) \right] \\ + \Delta t \left[\bar{\rho}^n (\nu^{\text{sgs}})^n \tilde{D}_{ij}^n \tilde{\Phi}_{ij}^n - C_\epsilon \frac{((\bar{\rho}k^{\text{sgs}})^n)^{\frac{3}{2}}}{\Delta} + \bar{S}_{k^{\text{sgs}}}^n \right]. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Die Werte für \tilde{u}^{n+1} , \tilde{h}^{n+1} und $(k^{\text{sgs}})^{n+1}$ ergeben sich durch Division mit der neu bestimmten Dichte ρ^{n+1} .

3.2.4 Druckkorrektur

Für die Bestimmung der Berechnungsgröße Druckparameter⁵⁾ steht keine Transportgleichung zur Verfügung, die integriert werden könnte. Stattdessen wird \bar{P} so bestimmt, dass das Geschwindigkeitsfeld die Kontinuitätsgleichung (3.17) beziehungsweise ihr diskretisiertes Gegenstück (3.74) erfüllt. Dazu wird das zeitliche Integral über den Druckparameter in einen Schätzwert P_0 und einen Korrekturdruck ϖ aufgespalten:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} dt = \Delta t \frac{\partial P_0}{\partial x_i} + \Delta t \frac{\partial \varpi}{\partial x_i} \quad (3.99)$$

⁵⁾Der Druckparameter \bar{P} setzt sich gemäß der Definition in Gleichung (3.33) aus dem gefilterten Druck \bar{p} und der Spur des Feinstrukturspannungstensors zusammen.

Für P_0 wird im Rahmen dieser Arbeit \tilde{P}^n verwendet, da dieser beim Setzen von Randwerten Vorteile bietet. Somit unterscheidet sich der Druck \tilde{P}^n vom gesuchten Druck \bar{P}^{n+1} um den Korrekturdruck:

$$\bar{P}^{n+1} = \tilde{P}^n + \varpi \quad (3.100)$$

Die im vorangegangenen Abschnitt beschriebene Zeitintegration der Impulsgleichungen führt aufgrund des noch unbekannten Korrekturdrucks zu einer Schätzung des Impulsfeldes \tilde{u}_i^{n*} , welches sich vom gesuchten Feld \tilde{u}_i^{n+1} nur um das Integral über den Korrekturdruck unterscheidet

$$(\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F_i dt - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} dt \quad (3.101)$$

$$\Leftrightarrow (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} F_i dt - \Delta t \frac{\partial P_0}{\partial x_i} - \Delta t \frac{\partial \varpi}{\partial x_i} \quad (3.102)$$

$$\Leftrightarrow (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n+1} = (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n*} - \Delta t \frac{\partial \varpi}{\partial x_i}. \quad (3.103)$$

Die Anwendung des Divergenz-Operators auf Gl. (3.103) führt auf eine Poisson-Gleichung für ϖ , deren Quellterm sich aufgrund des Predictor-Corrector-Verfahrens als Differenzenquotienten zusammensetzt:

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \varpi = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n*} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho}\tilde{u}_i)^{n+1} \right) \quad (3.104)$$

Innerhalb des Predictor-Schritts schreibt sich die Kontinuitätsgleichung (3.17)

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}\tilde{u}_i^{n*} = \bar{S}_\rho^{n+1} - \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \Big|_{t=t_{n*}}, \quad (3.105)$$

andererseits muss für jeden Zeitschritt die Massenbilanz erfüllt sein

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}\tilde{u}_i^{n+1} = \bar{S}_\rho^{n+1} - \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}}. \quad (3.106)$$

Setzt man Gl. (3.105) und (3.106) in Gl. (3.104), erhält man

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \varpi = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \Big|_{t=t_{n*}} - \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} \right). \quad (3.107)$$

Die Ableitung der Dichte nach der Zeit wird mit einem Differenzenquotienten approximiert

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \Big|_{t=t_{n+1}} = \frac{\bar{\rho}^{n+1} - \bar{\rho}^n}{\Delta t}. \quad (3.108)$$

Setzt man (3.108) in Gl. (3.107) ein, so folgt mit der Programmierung der Dichte $\bar{\rho}^{n+1}$ nach Gl. (3.28) als Ziel-Dichte $\bar{\rho}^{n+1}$ der Mischung schließlich

$$\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \varpi = \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{\bar{\rho}^{n+1} - \bar{\rho}^{n+1*}}{\Delta t} \right). \quad (3.109)$$

Gleichung (3.109) wird auf jeder Stufe der Zeitintegration mit geeigneten Randbedingungen nach dem Verfahren von Schumann und Sweet [167] gelöst⁶⁾. Anschließend werden $(\bar{\rho} \tilde{u}_i)^{n+1}$ und \bar{P}^{n+1} über die Korrektur der Schätzwerte (Gl. (3.100) und (3.103)) bestimmt. Diese Korrektur entspricht genau der Definition von ϖ , so dass keine Iteration notwendig ist.

Für die numerische Stabilität des Verfahrens wird mit einer geringen Unterrelaxation gearbeitet. Gl. (3.109) wird somit mit einem Relaxationsfaktor $\mathcal{K} = 0,5$ multipliziert. Mit diesem Faktor ergibt sich eine Abweichung zur Ziel-Dichte $\bar{\rho}^{n+1}$ pro Zeitschritt von etwa 10 %.

Die Lösung der Kontinuitätsgleichung (3.17) innerhalb eines inkompressiblen Verfahrens mit variabler Dichte ist nicht mit der Lösung dieser Gleichung im Rahmen eines kompressiblen Verfahrens gleichzusetzen, bei dem die thermische Zustandsgleichung (3.28) erfüllt wird. Vielmehr gehen bei angenommener Inkompressibilität keine absoluten Werte für ϖ , sondern nur die Gradienten in das Verfahren ein. So wird in Gl. (3.28) \bar{p} durch die Vorgabe eines angenommenen absoluten Druckniveaus bestimmt, welcher für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten Fälle Atmosphärendruck annimmt. Die Lösung der Transportgleichung für die Dichte $\bar{\rho}$ des Trägergases entspricht hierbei der Lösung der Transportgleichung für einen Stoff. Somit ist die Dichte nur eine Funktion der Temperatur und der Zusammensetzung und keine Funktion des Drucks.

3.2.5 Zeitschrittbegrenzung für Mehrphasenströmungen

Die numerische Simulation einer Mehrphasenströmung führt im Vergleich zu einer Einphasenströmung weitere, neue Zeitskalen ein, die Berücksichtigung finden müssen. Diese Zeitskalen tragen dem korrekten physikalischen Transport der dispersen Phase Rechnung. Um dabei Inkonsistenzen bezüglich des zeitlichen Voranschreitens für die Trägergasphase auf der einen Seite und der dispersen Phase auf der anderen Seite zu vermeiden, wird die disperse Phase mit dem gleichen Zeitschritt Δt transportiert, welcher auch für die Transportgleichungen der Trägergasphase Verwendung findet. Prinzipiell muss der verwendete Zeitschritt dem Minimum folgender Zeitskalen genügen:

$$\Delta t = \min \left\{ \Delta t_f, 0,25 \cdot \min \left\{ \sum_{l=1}^N \tau_{d,l} \right\}, \min \left\{ \sum_{l=1}^N \tau_{\text{int},l} \right\} \right\} \quad (3.110)$$

Hierbei bezeichnen Δt_f den LES-Gasphasen-Zeitschritt, τ_d die Partikelrelaxationszeit, sowie τ_{int} stellt die Interaktionszeit eines Partikels mit einem turbulenten Wirbel dar.

⁶⁾Die numerische Komplexität skaliert mit $(N \cdot \log N)$, wobei N die Anzahl der Gitterzellen bezeichnet

Für das im vorigen Kapitel 3.2.3 vorgestellte dreistufige Runge-Kutta-Verfahren muss im Rahmen eines expliziten Verfahrens das Zeitschrittweitenkriterium von Courant, Friedrichs und Levy

$$\frac{\Delta t_f \cdot |u|}{\Delta x} + \frac{\nu_{\text{eff}} \Delta t_f}{|\Delta x^2|} \leq \text{CFL} = 0,7 \quad (3.111)$$

eingehalten werden. Die CFL-Bedingung besagt, dass die Geschwindigkeit der physikalischen Ausbreitung von Störungen aufgrund von beispielsweise Konvektion oder Diffusion die lokale „numerische“ Geschwindigkeit $\Delta x / \Delta t_f$ nicht überschreiten darf.

Um den Transport der Partikelphase im Rahmen einer numerischen Simulation vorzunehmen, ist zu beachten, dass der verwendete Zeitschritt die maximal auftretende Partikelrelaxationszeit τ_d (Gl. (4.20) in Kapitel 4.1.2) und die Partikelinteraktionszeit τ_{int} der dispersen Phase nicht überschreitet. Letzteres Zeitlimit fußt auf dem in Kapitel 4.3.1 beschriebenen Ansatz zur Modellierung der Partikeldispersion in einer turbulenten Strömung.

3.3 Statistische Auswertung für die Simulation von Mehrphasenströmungen

Die bei der Durchführung einer Grobstruktursimulation einer Mehrphasenströmung anfallenden Daten müssen ausgewertet werden, um einerseits die Simulation zu verifizieren und um andererseits neue Erkenntnisse über die Strömung zu gewinnen. Im Folgenden soll im Hinblick auf die Ausführungen von [213] darauf näher eingegangen werden und die Vorgehensweise zur Auswertung der fluiden als auch der dispersen Phase dargelegt werden.

3.3.1 Bedeutung und Auswahl statistischer Größen

In den durchgeführten statistischen Auswertungen können nur die gefilterten Größen $\overline{\psi}^{\Delta A}(x, t)$ betrachtet werden, da die Grobstruktursimulation nur diese zur Verfügung stellt. Die aus einem Simulationslauf berechneten Momente bzw. Korrelationen erfassen daher grundsätzlich nur den Grobstrukturanteil. Dessen Fluktuation wird mit einem hochgestellten Subskript (') angezeigt, d.h.

$$\overline{\psi}^{\Delta A} = \overline{\overline{\psi}^{\Delta A}} + \psi' \quad (3.112)$$

Die Abkürzungen für den zeitlichen

$$\overline{\psi} = \overline{\overline{\psi}^{\Delta A}} \quad (3.113)$$

und räumlichen Mittelwert

$$\psi = \overline{\overline{\psi}^{\Delta A}} \quad (3.114)$$

dienen der vereinfachten Schreibweise. Für die Berechnung der Standardabweichung und Zweifachkorrelationen der Geschwindigkeit lassen sich die Feinstruktureffekte abschätzen. Wie bei

Weinberger [213] gezeigt, sind diese Größen für Einphasenströmungen häufig zu vernachlässigen. Bei der Simulation von LES-basierten Mehrphasenströmungen ist jedoch die Berücksichtigung der Feinstrukturanteile unabdingbar, da die Modellierung der physikalischen Effekte, die zwischen beiden Phasen auftreten, insbesondere durch die Feinstruktur abgebildet werden.

Mittelwerte und Standardabweichung der Geschwindigkeiten

Die Mittelwerte der Geschwindigkeiten sind deren Moment erster Ordnung und berechnen sich als Mittelung von N unabhängigen Stichproben l :

$$\overline{u_i^{\Delta A}} = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \overline{u_{i,l}^{\Delta A}} \quad (3.115)$$

Die Varianzen sind deren Momente zweiter Ordnung:

$$\overline{u_i'^2} = \frac{1}{N-1} \sum_{l=1}^N (\overline{u_{i,l}^{\Delta A}} - \overline{u_i^{\Delta A}})^2 \quad (3.116)$$

Die Standardabweichung (Wurzel der Varianz; rms-Wert⁷⁾) ist ein Maß für die Schwankungsintensität der turbulenten Bewegung. Mit $\psi = \overline{u_i^{\Delta A}}$ werden nur die Schwankungen der aufgelösten Skalen erfasst. Falls der Beitrag der Feinstrukturenergie nicht durch die in Kapitel 3.1.2.2 beschriebene Transportgleichung erhalten wird, kann dieser unter Annahme isotroper Verteilung nach Lilly [102] abgeschätzt werden,

$$k^{\text{sgs}} = \frac{\nu_t^2}{(C_2 \Delta)^2}, \quad C_2 = 0,094, \quad (3.117)$$

so dass sich die Standardabweichung der Geschwindigkeiten unter Berücksichtigung der Feinstrukturenergie berechnen zu

$$\sqrt{\overline{u_i'^2}} = \sqrt{(\overline{u_i^{\Delta A}} - \overline{u_i^{\Delta A}})^2 + \frac{2}{3} k^{\text{sgs}}}. \quad (3.118)$$

Hinsichtlich der Bestimmung der mittleren Geschwindigkeiten und Standardabweichungen der dispersen Phase ergibt sich dieser Wert als Mittelung über N sich in einem betrachteten Kontrollvolumen befindlichen Partikel

$$\overline{u_{d,i}^{\Delta N}} = \frac{\sum_{l=1}^N N_{d,l} \overline{u_{d,i,l}}}{\sum_{l=1}^N N_{d,l}}, \quad (3.119)$$

⁷⁾engl.: root mean square

bzw.

$$\sqrt{(u_{d,i}^2)^{\Delta N}} = \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^N N_{d,l} (u_{d,i,l} - \overline{u_{d,i,l}^{\Delta N}})^2}{\sum_{l=1}^N N_{d,l}}}. \quad (3.120)$$

(Die Auswertung des mittleren Partikel- / Tropfendurchmessers ergibt sich in analoger Weise durch Anwendung von Gl. (3.119))

Zweipunkt-Korrelationsfunktionen

Ausgewertet werden räumliche Zweipunkt-Korrelationsfunktionen der Geschwindigkeit

$$R_{ij}^E(\vec{x}, t, \vec{r}, 0) = \frac{\overline{u_i'(\vec{x}, t) u_j'(\vec{x} + \vec{r}, t)}}{\sqrt{\overline{u_i'^2(\vec{x}, t)}} \sqrt{\overline{u_j'^2(\vec{x}, t)}}}. \quad (3.121)$$

Integrale Längenmaße

Die integralen Längen- und Zeitmaße geben Aufschluss über die typische Ausdehnung und Lebensdauer großräumiger Strukturen. Formal berechnen sie sich aus der Integration der Zweipunkt-Korrelationsfunktionen R_{ij}^E . Für die Integration kommt die Trapezregel zur Anwendung, wobei als obere Integrationsgrenze der erste Nulldurchgang von R_{ij}^E gewählt wird.

Leistungsdichtespektren des Geschwindigkeitsfeldes

Die Ermittlung der Spektren erfolgt mittels einer Fast-Fourier-Transformation (FFT) diskret vorliegender Funktionsverläufe. Grundlage des Amplitudenspektrums der Axialgeschwindigkeit ist die FFT ihres zeitlichen Verlaufs $u(t_k) = u_k$ mit $t_k = k \Delta t$; $k = 0, \dots, N - 1$. Zeitliche Leistungsdichtespektren und eindimensional räumliche Leistungsdichtespektren hingegen werden aus den Fast-Fourier-Transformationen der zugehörigen diskret vorliegenden zeitlichen bzw. räumlichen Korrelationsfunktion $R_{ij}^E(x, t, 0, \tau = t_k)$ und $R_{ij}^E(x, t, r = x_k, 0)$ mit $x_k = k \Delta x$ ermittelt. Mit $i = j$ kann die aufwendige Berechnung der Korrelationsfunktionen vermieden werden. Die Bestimmung des Energiespektrums ist in diesem Fall mit einer äquivalenten, jedoch leichter zu realisierenden Vorgehensweise möglich. Für alle Orte, an denen Spektren bestimmt werden sollen, wird der zeitliche Verlauf der Geschwindigkeitskomponenten in äquidistanten Abständen protokolliert

$$u_k = u(t_k); \quad t_k = k \Delta t; \quad k = 0, \dots, N - 1; \quad N = 2^{I \in N}. \quad (3.122)$$

Danach wird die Fourier-Transformierte \hat{U}_i der Geschwindigkeitskomponente

$$\hat{U}_i\left(\frac{n}{N \Delta t}\right) = \int_{-\infty}^{\infty} u(t) e^{\frac{2\pi i n t}{N \Delta t}} dt \approx \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} u_k e^{\frac{2\pi i k n}{N}}, \quad n = -N/2, \dots, N/2 \quad (3.123)$$

berechnet [15]. Aus den Beträgen der komplexen Fourier-Transformierten \hat{U}_i berechnet sich das gesuchte Spektrum zu

$$E_{u_i u_i}(\kappa_t) = \frac{1}{N} \left| \hat{U}_i \right|^2. \quad (3.124)$$

Die Frequenz κ_t ist dabei wie folgt definiert

$$\kappa_t = \frac{m}{N/2 \Delta t}, \quad m = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}. \quad (3.125)$$

Die Energiespektren E sind in den graphischen Darstellungen über der Frequenz, bzw. Wellenzahl aufgetragen. Analog zur Frequenz ergibt sich die Wellenzahl κ_x aus

$$\kappa_x = \frac{m}{N/2 \Delta x}, \quad m = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}. \quad (3.126)$$

3.3.2 Nomenklatur statistischer Größen

Für die Schreibweisen von gefilterten und statistisch gemittelten Größen werden häufig gleiche Symbole verwendet (nach [47]). Beispielsweise kann eine überstrichene Größe $\overline{\psi}$ sowohl den gefilterten Wert als auch das statistische Mittel von ψ bedeuten. Um eine Unterscheidung zu erleichtern, wird im Folgenden das statistische Mittel einer Größe mit spitzen Klammern

$$\overline{\psi}^{\text{stat.}} \equiv \langle \psi \rangle \quad (3.127)$$

gekennzeichnet. Mit der statistischen Mittelung, alternativ auch als Reynoldsmittelung bezeichnet, wird die Aufspaltung

$$\psi = \langle \psi \rangle + \psi' \quad (3.128)$$

in Mittelwert und Schwankungsgröße durchgeführt. Letztere wird genau wie die Abweichung vom gefilterten Mittelwert mit einem Hochkommata gekennzeichnet. Aus diesem Zusammenhang heraus wird jeweils klar sein, welche der beiden Bedeutungen gemeint ist. Die momentane Abweichung wird wie bei der Filterung mit einem Hochkommata bezeichnet. Für die statistischen Momente, wie der Varianz, ergibt sich

$$\overline{\psi'^2}^{\text{stat.}} = \langle \psi'^2 \rangle. \quad (3.129)$$

3.3.3 Kriterien der statistischen Auswertung

Die LES liefert die momentanen Verteilungen aller berechneten Strömungsgrößen an jedem Punkt des Rechengebiets. Da der Vergleich mit Experimenten oder Ergebnissen aus der statistischen Turbulenzmodellierung zumeist auf der Grundlage von zeitgemittelten Größen erfolgt, ist die statistische Auswertung der berechneten Daten erforderlich.

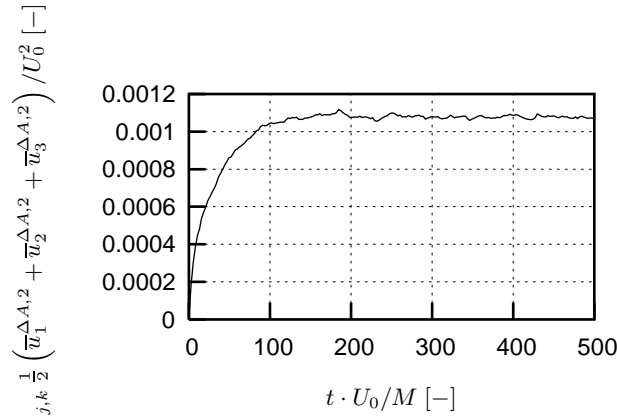


Abbildung 3.4: Zeitlicher Verlauf der aufgelösten Skalen der kinetischen Energie des gesamten Rechengebiets

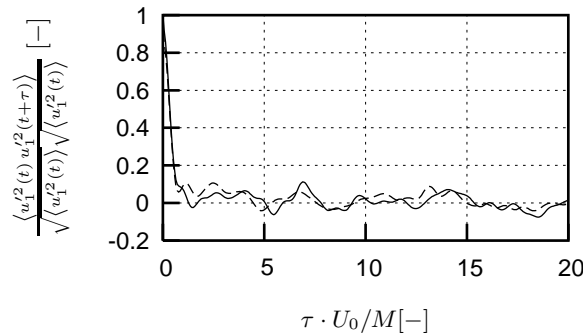


Abbildung 3.5: Zeitlicher Verlauf der axialen Autokorrelationsfunktion; $x/M = 20$: —, $x/M = 35$: ---

Die Vorgehensweise bezüglich der Auswertung soll anhand der in Kapitel 5 besprochenen Fallstudie erläutert werden. Der zeitliche Verlauf der Berechnung ist durch zwei Bereiche charakterisiert. Bedingt durch die nicht-viskose Anfangsverteilung und das am Strömungseintritt für jeden Zeitschritt vorgegebene Einstromsignal stellt sich zunächst ein transienter Vorgang ein. Nach ungefähr 5 Durchlaufzeiten H_x/U_0 hat sich ein typisches Geschwindigkeitsfeld eingestellt. Ab diesem Zeitpunkt kann die disperse Phase initiiert werden. Mit dem Erreichen eines stationären Zustands erfolgt die Aufnahme von Stichproben.

Statistisch stationärer Zustand und Statistische Unabhängigkeit

Zur Beurteilung des Beginns des stationären Zustands bietet sich der zeitliche Verlauf der kinetischen Energie der aufgelösten Skalen an. Diese Größe ist, aufsummiert über alle Maschenvolumina des Rechengitters, eine globale, skalare Größe. Abbildung 3.4 zeigt die typische Entwicklung dieser Größe. Der transiente Vorgang ist etwa bei $t U_B/M = 200$ abgeschlossen. Mit einem Zeitschritt von $\Delta t U_B/M = 0,065$ entspricht dies etwa einer Zeitschrittzahl von 3000.

Die aufgenommenen Stichproben sollen voneinander unabhängig sein. Anhand der zeitlichen

Korrelationsfunktion lässt sich diese Forderung überprüfen. Um unkorrelierte Stichproben zu erhalten, muss der Korrelationskoeffizient R_{ij}^E gegen Null abgeklungen sein, bevor die darauffolgende Stichprobe genommen wird. In Abbildung 3.5 sind typische Verläufe der zeitlichen axialen Autokorrelationsfunktion in der Kanalströmung an zwei verschiedenen x/M -Positionen dargestellt. Von Bedeutung ist die Verschiebung des Nulldurchgangs zu größeren Werten mit zunehmender Entfernung vom Einstromrand. Dieses Verhalten zeigt das typische Ansteigen der Längen- und Zeitmaße in der Strömung.

4 Lagrange'sche Berechnung der dispersen Phase

Inhalt dieses Kapitels ist die Lagrange'sche Berechnung der dispersen Phase. Hierbei werden die Grundgleichungen der Partikel- / Tropfenphase, die Darstellung der Phasenwechselwirkung sowie die Methode der numerischen Partikelverfolgung erläutert.

4.1 Modellierung ohne Phasenübergang

4.1.1 Basset-Boussinesq-Oseen-Gleichung

Die heutzutage allgemeine Form der verwendeten Partikelbewegungsgleichung beruht auf den Untersuchungen von Basset [6], Boussinesq [11] und Oseen [132, 133], genannt Basset-Boussinesq-Oseen- (BBO-) Gleichung [48]. In diesen Arbeiten wurde die Bewegung eines festen, kugelförmigen, nicht rotierenden und nicht deformierbaren Partikels für schleichende Strömungen, d.h. für eine sehr langsame Partikelbewegung untersucht. Das umgebende Fluid wurde als ruhend angesehen. Die Kraft, die sich auf das sich bewegende Partikel in dieser ruhenden Umgebung einstellt, wurde auf analytischem Wege durch Integration über die Partikeloberfläche erhalten, wobei der nichtlineare, konvektive Anteil durch die Betrachtung hinreichend kleiner Partikel-Reynoldszahlen (Gl. (2.9)) vernachlässigt wurde [48, S. 58 ff.]. In der eindimensionalen Formulierung ergibt sich die BBO-Gleichung zu:

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\rho_d \frac{\pi}{6} D_d^3 \frac{du_d}{dt}}_{\text{Trägheitskraft}} = & \underbrace{3 \pi \mu D_d u_d}_{\text{Widerstandskraft}} + \underbrace{\frac{1}{2} \rho \frac{\pi}{6} D_d^3 \frac{du_d}{dt}}_{\text{virtuelle Masse}} + \underbrace{\frac{\pi}{6} D_d^3 (\rho_d - \rho) g}_{\text{Result. Auftrieb}} \\
 & + \underbrace{\frac{3}{2} D_d^2 \sqrt{\pi \rho \mu} \int_{t_0}^t \frac{du_d}{d\tau} \frac{1}{\sqrt{t - \tau}} d\tau}_{\text{Bassetkraft}}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Die so erhaltene Gleichung enthält die Stokes'sche Widerstandskraft, die Kraft durch die sogenannte virtuelle Masse, einen von der Zeit abhängigen Integralterm, der die Historie der Partikelbewegung berücksichtigt (Basset-Term), die Gravitationskraft sowie die Archimedische Auftriebskraft.

In der Vergangenheit wurde die BBO-Gleichung einer mehrfachen Überarbeitung unterzogen. So führte Tchen [198] in seiner Dissertationsschrift eine Relativgeschwindigkeit zwischen Fluid

und Partikel ein, ohne dies streng mathematisch durch das Lösen der Navier-Stokes-Gleichung zu tun. Auch fügte er der BBO-Gleichung eine Druckkraft hinzu, die die Wirkung des lokalen Druckgradienten des Trägerfluids auf das Partikel berücksichtigt:

$$\begin{aligned} \rho_d \frac{\pi}{6} D_d^3 \frac{du_d}{dt} = & 3\pi\mu D_d (U - u_d) - \frac{\pi}{6} D_d^3 \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \rho \frac{\pi}{6} D_d^3 \frac{d(U - u_d)}{dt} \\ & + \frac{\pi}{6} D_d^3 (\rho_d - \rho) g + \frac{3}{2} D_d^2 \sqrt{\pi\rho\mu} \int_{t_0}^t \frac{d(U - u_d)}{d\tau} \frac{1}{\sqrt{t - \tau}} d\tau \end{aligned} \quad (4.2)$$

Weitere Arbeiten, die die Restriktionen für den Gültigkeitsbereich zu erweitern versuchten, finden sich beispielsweise bei Maxey [112] und Maxey & Riley [113]. Im Wesentlichen gelten jedoch alle bekannten Formulierungen der BBO-Gleichungen in ihrer exakten, analytisch gewonnenen Form nur unter folgenden Voraussetzungen:¹⁾

1. Zwischen zwei Partikeln muss der Abstand hinreichend groß sein (Isolierte Partikelbewegung).
2. Es treten keine Wechselwirkungen mit festen Wänden auf.
3. Die Partikel-Reynoldszahl muss der Bedingung $Re_d \ll 1$ genügen.
4. Bei der analytischen Behandlung der Druckkraft, d.h. bei der Lösung des ungestörten Strömungsfeldes, wird gefordert, dass die Abmessungen der Partikel (D_d) klein sind im Vergleich zu dem charakteristischen Längenmaß, welches den Gradienten der Strömung dominiert: $D_d/(2L) \ll 1$.

In Anlehnung an die Diskussion in [48] stellen insbesondere die Voraussetzungen (3) und (4) eine gravierende Einschränkung für turbulente Mehrphasenströmungen, wie sie im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden, und die somit auch ingenieurtechnische Relevanz haben, dar. Für Partikel-Reynoldszahlen $Re_d \gg 1$ können die konvektiven, nichtlinearen Terme in den Grundgleichungen nicht mehr vernachlässigt werden. Eine theoretische Herleitung der Partikelbewegungsgleichung ist für solche Fälle bisher jedoch noch nicht gelungen (s. [48]). Dies führte dazu, dass ausgehend von Gl. (4.2), in einigen Termen semi-empirische Funktionen eingeführt wurden, um eine Übereinstimmung der so beschriebenen Partikelbewegung mit experimentellen Daten zu erhalten [48]. Ein Beispiel einer derart erweiterten Partikelbewegungsgleichung jenseits des Stokes'schen Strömungsregimes findet sich u.a. bei Hansell et al. [66]. Um den Einfluss der konvektiven Terme in den Gleichungen der Fluidströmung zu berücksichtigen, führten Hansell et al. Modifikationen für den Stokes'schen Widerstand, den Term der virtuellen Masse und den Basset-Term in die BBO-Gleichung ein [48]. Mit der Abschätzung des Druckgradienten

¹⁾ [48, S. 59]

$-\frac{\partial p}{\partial x_i} = \rho \frac{DU}{Dt}$ und der Division durch die Masse des Partikels $\rho_d \frac{\pi}{6} D_d^3$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{du_d}{dt} = & \frac{3}{4} \frac{C_W}{D_d} \frac{\rho}{\rho_d} |U - u_d| (U - u_d) + \frac{\rho}{\rho_d} \frac{DU}{Dt} + \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_d} C_{VM} \frac{d(U - u_d)}{dt} \\ & + \frac{(\rho_d - \rho)}{\rho_d} g + \frac{9}{D_d} \frac{\rho}{\rho_d} \left(\frac{\nu}{\pi} \right)^{1/2} C_B \int_{t_0}^t \frac{d(U - u_d)}{d\tau} \frac{1}{\sqrt{t - \tau}} d\tau \end{aligned} \quad (4.3)$$

In Gl. (4.3) stellt der Term $\frac{DU}{Dt}$ die totale zeitliche Ableitung der Fluidgeschwindigkeit eines mit dem Partikel sich bewegenden Beobachter dar, d.h. es ist

$$\frac{DU}{Dt} = \frac{\partial U}{\partial t} + u_d \frac{\partial U}{\partial x_j}. \quad (4.4)$$

Zudem stehen die Koeffizienten C_W , C_{VM} und C_B für semi-empirische Beiwerte der Widerstandskraft, der Kraft aufgrund der virtuellen Masse und der Basset-Kraft. Der Widerstandsbeiwert C_W wird in Abhängigkeit von der Partikel-Reynoldszahl Re_d experimentell bestimmt. Für die anderen beiden Kraftbeiwerte gelten nach Faeth [44] Abhängigkeiten von der Partikel-Reynoldszahl und der Beschleunigungszahl A_C , die durch folgende Beziehung gegeben ist:

$$A_C = \frac{\left| \frac{d(U - u_d)}{dt} \right|}{|U - u_d|^2} D_d \quad (4.5)$$

Odar & Hamilton [130] geben die folgenden Werte für C_{VM} und C_B

$$C_{VM} = 2,1 - \frac{0,132 A_C^2}{(1 + 0,12 A_C^2)}, \quad (4.6)$$

$$C_B = 0,48 + \frac{0,52 A_C^3}{(1 + A_C^3)}. \quad (4.7)$$

Für Strömungssituationen, die von der BBO-Gleichung (4.3) bisher nicht erfasst wurden, wie beispielsweise für den Auftrieb eines rotierenden Partikels (Magnus-Kraft) und für die auf ein Partikel in einer Fluidscherströmung wirkende Auftriebskraft (Saffmann-Kraft) werden in der Regel zusätzliche Kraftterme in die BBO-Gleichung aufgenommen (s. [48]). Da jedoch im Rahmen dieser Arbeit turbulente Mehrphasenströmungen mit einem Dichteverhältnis von $\rho/\rho_d \ll 1$ behandelt werden, beschränkt sich die folgende Betrachtung auf die Beschreibung der Widerstandskraft sowie des Einflusses der Gravitation und des Archimedischen Auftriebs. Um die Komplexität des Lagrange-Moduls innerhalb eines LES-basierten Euler-Lagrange-Verfahrens zu beschränken, werden somit die Kräfte, welche für die Rotationsbewegung des individuellen Partikels verantwortlich sind (Magnus- und Saffmann-Kraft) ausgeklammert, und nur jene Kräfte beschrieben, die für die translatorische Partikelbewegung verantwortlich sind. Im Rahmen dessen wird die Druckkraft, genauso wie die Kraft der virtuellen Masse und die Basset-Kraft innerhalb der verwendeten Partikelbewegungsgleichung nicht berücksichtigt.

Die Druckkraft ist in der Regel nur dann von Bedeutung, wenn die Druckgradienten in der Fluidströmung sehr groß und die Partikeldichte gering oder vergleichbar mit der des Fluids ist. Für Gas-Feststoff-Strömungen kann diese Kraftwirkung somit in aller Regel vernachlässigt werden. Die Kraft der virtuellen Masse, die von der Haftbedingung des umgebenden Fluids an der Oberfläche des Partikels herrührt und aufgrund der Verdrängung der Fluidmasse zu einem erhöhten Strömungswiderstand führt, kann gleichfalls vernachlässigt werden, da der resultierende Kraftterm proportional zu ρ/ρ_d und somit klein ist. Wegen der Komplexität des Basset-Kraftterms und des sehr hohen Aufwands seiner numerischen Berechnung wird die Basset-Kraft gerne vernachlässigt. Dies ist für Strömungen mit einem kleinem Dichteverhältnis $\rho/\rho_d \ll 1$ durchaus begründet, da der Einfluss der Basset-Kraft auf die Partikelbewegung tatsächlich sehr gering ist. Dies zeigen auch Untersuchungen von Kim et al. [76], die nachweisen konnten, dass schon für ein Dichteverhältnis von $\rho/\rho_d = 200$ eine Abhängigkeit der auf das Partikel wirkenden summarischen Kraft des Basset-Kraftterms kaum noch existiert. Zu ähnlichen Aussagen gelangt auch Kohnen [82]. Aufgrund dieser Untersuchungen wird im Rahmen dieser Arbeit die Basset-Kraft in den weiteren Betrachtungen gleichfalls vernachlässigt.

Die schließlich im Rahmen dieser Arbeit in Betracht gezogene Partikelbewegungsgleichung ergibt sich aus Gl. (4.3) somit zunächst noch in der eindimensionalen Formulierung zu:

$$\frac{du_d}{dt} = \frac{3}{4} \frac{C_W}{D_d} \frac{\rho}{\rho_d} |U - u_d| (U - u_d) + \frac{(\rho_d - \rho)}{\rho_d} g. \quad (4.8)$$

4.1.2 Lagrange'sche Bewegungsgleichung für das Einzelpartikel bei höheren Reynoldszahlen und kleinem Dichteverhältnis

Da eine analytische Herleitung der Bewegungsgleichung für ein individuelles Partikel im Fluidströmungsfeld nur unter sehr einschränkenden Annahmen möglich ist, geht man auf den folgenden Seiten von einer Bilanzierung aller auf das Einzelpartikel wirkenden Kräfte aus und versucht diese in geeigneter Weise unter Zuhilfenahme experimenteller Erkenntnisse mathematisch zu beschreiben.²⁾ In diese semi-empirischen Betrachtungen fließen die bei der Herleitung und Evaluierung der BBO-Gleichung für schleichende Partikelumströmung gewonnenen Erkenntnisse mit ein, so dass die so erhaltene semi-empirische Partikelbewegungsgleichung für $Re_d \rightarrow 0$ asymptotisch in die BBO-Gleichung übergeht. Bezug nehmend auf den letzten Absatz des vorigen Abschnitts bestehen die zu bilanzierenden Kräfte aus der Widerstandskraft \vec{F}_W , der Gravitation \vec{F}_G und dem Archimedischen Auftrieb \vec{F}_A .

Die translatorische Bewegung des Partikels wird durch die Impulserhaltung beschrieben, wonach die Änderung des Partikelimpulses gleich der Summe der auf das Partikel einwirkenden äußeren Kräfte ist. Für ein Partikel mit konstanter Masse $m_d = \rho_d \frac{\pi}{6} D_d^3$ lautet die Impulsgleichung in der dreidimensionalen Formulierung:

$$m_d \frac{d\vec{V}_d}{dt} = \vec{F}_W + \vec{F}_G + \vec{F}_A \quad (4.9)$$

²⁾nach [48, S. 61-73]

$\vec{\mathcal{V}}_d$ ergibt sich hierbei zu

$$\vec{\mathcal{V}}_d = \begin{pmatrix} u_{d,1} \\ u_{d,2} \\ u_{d,3} \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Die aerodynamische Widerstandskraft

Die Wirkung der aerodynamischen Widerstandskraft \vec{F}_W auf ein Partikel in einer parallelen Fluidströmung resultiert aus einem Reibungs- und einem Druckwiderstand. Der Reibungswiderstand wird durch die Haftbedingung des Fluids auf der Partikeloberfläche verursacht. Der Druckwiderstand resultiert aus einer ungleichmäßigen Druckverteilung an der Partikeloberfläche. Dabei ist der Druck, der auf die stromab gelegene Seite des Partikels wirkt, kleiner als der auf die stromauf gelegene Seite. Die resultierende Kraft ist der Partikelbewegung entgegengerichtet. Die summarisch resultierende Kraftwirkung ist dabei quantitativ stark abhängig von der Art und Weise der Partikelumströmung durch das Fluid. Die Gleichung zur Bestimmung der Widerstandskraft lautet:

$$\vec{F}_W = \frac{\pi}{8} C_W \rho D_d^2 |\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}}| \vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}} \quad (4.11)$$

$\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}}$ ergibt sich hierbei zu

$$\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}} = \begin{pmatrix} U_1 - u_{d,1} \\ U_2 - u_{d,2} \\ U_3 - u_{d,3} \end{pmatrix}. \quad (4.12)$$

Gleichfalls ergibt sich für $|\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}}|$:

$$|\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}}| = \sqrt{(U_1 - u_{d,1})^2 + (U_2 - u_{d,2})^2 + (U_3 - u_{d,3})^2} \quad (4.13)$$

Der zur Bestimmung von \vec{F}_W benötigte Widerstandsbeiwert C_W ist häufig eine mit Experimenten bestimmte empirische Größe, die hauptsächlich von der Partikel-Reynoldszahl Re_d abhängig ist. In der Vergangenheit wurden dazu eine große Anzahl zuverlässiger experimenteller und theoretischer Untersuchungen für kugelförmige Partikel durchgeführt. Für die Verwendung der experimentellen Ergebnisse in numerischen Simulationen existieren davon abgeleitet eine Vielzahl von abschnittswisen Anpassungen, wobei die Abweichungen der daraus berechneten Widerstandsbeiwerten zu den experimentellen Daten je nach Autor und Anzahl der einbezogenen Messwerte zwischen 0,9 bis zu 30 % betragen.

Clift et al. [20] empfehlen in ihrem Buch eine abschnittsweise Approximation basierend auf Korrelationen, für die sie einen mittleren Fehler von weniger als 5 % gegenüber den verwendeten Messwerten angeben. Für die Herleitung der Beziehungen wurden die experimentellen Arbeiten aus 28 Publikationen ausgewertet. Wegen des hohen numerischen Berechnungsaufwands für die logarithmischen Korrelationen wird für die Berechnungen in dieser Arbeit eine abschnittsweise

Tabelle 4.1: Werte für die Parameter a , b , c aus Gl. (4.14) zur Berechnung des Widerstandsbeiwertes $C_W = C_W(Re_d)$ nach Morsi und Alexander [124]

Re_d -Bereich	a	b	c
$0 < Re_d < 0,1$	0	24	0
$0,1 \leq Re_d < 1$	0,0903	22,73	3,69
$1 \leq Re_d < 10$	-3,8889	29,1667	1,222
$10 \leq Re_d < 100$	-116,67	46,5	0,6167
$100 \leq Re_d < 1000$	-2778	98,33	0,3644
$1000 \leq Re_d < 5000$	-47500	148,62	0,357
$5000 \leq Re_d < 10000$	-578700	-490,546	0,46
$10000 \leq Re_d < 50000$	-5416700	-1662,5	0,5191
$50000 \leq Re_d$	0	0	0,49

Approximation der Standard- C_W -Kurve von Morsi und Alexander [124] verwendet, die sich mit Hilfe der folgenden Gleichung darstellen lässt:

$$C_W = a Re_d^{-2} + b Re_d^{-1} + c \quad (4.14)$$

Die Werte für a , b , c sind wiederum von der Größe der Partikel-Reynoldszahl abhängig und sind in Tabelle 4.1 angegeben.

Gravitation und Archimedischer Auftrieb

Die auf ein Partikel der Masse m_d wirkende Gravitationskraft und der hydrostatische oder auch Archimedische Auftrieb werden berechnet aus:

$$\vec{F}_G + \vec{F}_A = m_d \vec{g}_i + m \vec{g}_i = m_d \frac{\rho_d - \rho}{\rho_d} \vec{g}_i = \frac{\pi}{6} D_d^3 (\rho_d - \rho) \vec{g}_i \quad (4.15)$$

Der Einfluss des hydrostatischen Auftriebs auf die Partikelbewegung ist für $\rho \ll \rho_d$ sehr gering. Die Berücksichtigung dieser Kraftwirkung ist jedoch ohne zusätzlichen Berechnungsaufwand möglich.

Weitere äußere Kraftwirkungen

In Abhängigkeit von der betrachteten Anwendung können weitere Volumenkräfte auf das Partikel wirken. Bewegt sich ein Partikel beispielsweise in einem elektrischen Feld und bildet sich eine elektrische Ladung des Partikels, so wirkt auf das Partikel die sogenannte Coulomb'sche Kraft \vec{F}_E , die proportional zur Stärke des anliegenden elektrischen Feldes \vec{E}_q und zur Ladung des Partikels q_d ist:

$$\vec{F}_E = q_d \vec{E}_q \quad (4.16)$$

Diese Kraft ist maßgeblich für die Funktionsweise von elektrischen Abscheidern verantwortlich. Aber auch beim pneumatischen Transport von elektrisch stark aufgeladenen Partikeln in

Kunststoffrohrleitungen können diese elektrostatischen Kraftwirkungen die gleiche Größenordnung wie die aerodynamischen Kräfte auf das Einzelpartikel erreichen. Die Schwierigkeit in der quantitativen Bestimmung dieser Kraftwirkung besteht in aller Regel darin, die sich auf dem Partikel im Verlauf seiner Bewegung im umgebenden elektrischen Feld aufbauende Ladung exakt zu bestimmen. Grundsätzlich können bei der Aufladung von Partikeln zwei Mechanismen unterschieden werden:

1. Man spricht von einer Feldaufladung, wenn die Ionen entlang elektrischer Feldlinien driften und dabei zur Partikeloberfläche gelangen. Dieser Aufladungsmechanismus ist durch einen Endwert, genannt Sättigungsladung, gekennzeichnet [163]. Die Feldaufladung ist bei hohen Feldstärken und Partikeldurchmessergrößen $D_d \geq 2 \cdot 10^{-6} \text{m}$ dominierend.
2. Bei kleinen Partikeldurchmessergrößen ist zusätzlich die Diffusionsaufladung zu berücksichtigen, die aufgrund der stochastischen, thermischen Bewegung von Ionen und Partikeln entsteht. Diese ist insbesondere für submikrone Partikelgrößen von Bedeutung [163].

Neben den Problemen, die mit der Beschreibung des Aufladungsprozesses der Partikel zusammenhängen, führt die Ladung des Partikels wiederum zu einer Beeinflussung der Stärke des elektrischen Feldes in seiner Umgebung. Diese Wechselwirkung führt zu einer Kopplung der strömungsmechanischen Problemstellung mit der Lösung der Maxwell'schen Grundgleichungen zur Bestimmung der elektrischen Feldstärke. Dies führt zu einer Modifikation von Gl. (4.16). Formulierungen hierzu und weiterführende Untersuchungen für die Bestimmung von \vec{F}_E finden sich u. a. bei Schmid [163].

Weitere Kraftwirkungen aufgrund von äußeren Volumenkräften sind möglich und hängen von der konkreten Anwendung ab. Da in dieser Arbeit im Folgenden keine Fluid-Partikel-Strömungen betrachtet werden, in denen ein elektrisches Feld vorliegt, werden diese Kräfte innerhalb der Partikelbewegungsgleichung nicht weiter berücksichtigt.

Kräfte in der Nähe von Strömungsberandungen

Die bisher vorgenommene Analyse der Kraftwirkungen auf ein individuelles Partikel gilt streng genommen nur für ein Partikel in wandferner (freier) turbulenter Fluidströmung. Bewegt sich ein Partikel in unmittelbarer Wandnähe, so kann sich das Kräftesystem am Einzelpartikel gegenüber den bisher diskutierten Kraftansätzen stark ändern. Hierfür sind im Wesentlichen die folgenden physikalischen Mechanismen verantwortlich:

1. Die Wechselwirkung zwischen Fluid und Wand (Haftbedingung) führt zu einem gescheerten Strömungsprofil und im Fall einer turbulenten Strömung zu dem bekannten Aufbau einer turbulenten Grenzschichtstruktur. Für das Partikel ist insbesondere die homogene, ungestörte Anströmung durch das Fluid nicht gegeben, die eine Grundvoraussetzung für die Gültigkeit der bisher diskutierten Kraftformulierung ist. Die Symmetrie der Partikelumströmung wird unmittelbar beeinflusst.
2. Nähert sich das kugelförmige Partikel einer Wand, so wird zwischen Partikel und Wand die Strömung eingeschnürt, wodurch faktisch der Partikelumströmung auf der Wand zu-

gewandten Seite die Geometrie einer Düsenströmung überlagert wird. Dieser Effekt wird besonders stark in unmittelbarer Wandnähe wirksam. Das Ergebnis ist eine sehr stark asymmetrische Partikelumströmung mit den entsprechenden Folgen für die Kräftebilanz des Einzelpartikels in unmittelbarer Wandnähe.

Eine Quantifizierung dieser Wandeffekte ist außerordentlich schwierig und Gegenstand vieler detaillierter Untersuchungen [156]. Aufgrund dessen, dass das aus diesen experimentellen Untersuchungen resultierende Material wenig systematisch ist, entzieht es sich einer Berücksichtigung im Rahmen einer numerischen Simulation. Dies ist zum einen aus Mangel an verallgemeinerungsfähigen und durch mathematische Formulierungen ausdrückbaren Korrekturen der Kraftansätze in freier, turbulenter Strömung bedingt. Zum anderen verhindert die in der numerischen Simulation erzielbare numerische Auflösung in der Orts- und Zeitdiskretisierung die Berücksichtigung der in Wandnähe veränderten Kräftebilanz für das Einzelpartikel. So liegt der Geltungsbereich vieler verfügbarer Ansätze für beispielsweise eine modifizierte Widerstands- und Auftriebskraft häufig in einem Bereich nahe der Wand mit $z < 5 D_d$. Dieser Bereich, in dem eine quantitativ signifikante Beeinflussung der Widerstands- und Auftriebskräfte existiert, liegt für disperse Phasen, wie sie im Rahmen dieser Arbeit betrachtet werden, im Mikrometerbereich. Daraus folgt, dass die entsprechenden Kraftwirkungen auf ein individuelles Partikel in Wandnähe für Partikel-Fluidströmungen mit einem großem Dichteunterschied zwischen kontinuierlicher und disperser Phase von $\rho/\rho_d \ll 1$ nur einen stark vernachlässigbaren Beitrag zur Partikelbewegung liefern. Aus diesem Grund werden die veränderten Kraftwirkungen auf Partikel in der Nähe von Strömungsberandungen im Folgenden nicht weiter berücksichtigt.

Damit sind alle relevanten Kräfte beschrieben, die die translatorische Bewegung eines Partikels bestimmen. Schließlich ergeben sich die folgenden gewöhnlichen Differentialgleichungen zur Beschreibung des Partikelortes und der Partikelgeschwindigkeit:

$$\frac{d\vec{\mathcal{X}}_d}{dt} = \vec{\mathcal{V}}_d \quad (4.17)$$

$$\frac{d\vec{\mathcal{V}}_d}{dt} = \frac{3}{4} \frac{C_W}{D_d} \frac{\bar{\rho}}{\rho_d} |\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}}| \vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}} + \frac{(\rho_d - \bar{\rho})}{\rho_d} \vec{g}_i \quad (4.18)$$

Der Ortsvektor der Partikel $\vec{\mathcal{X}}_d$ ergibt sich hierbei zu

$$\vec{\mathcal{X}}_d = \begin{pmatrix} X_{d,1} \\ X_{d,2} \\ X_{d,3} \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

In Gl. (4.18) ist zudem die Partikelrelaxationszeit enthalten:

$$\tau_d = \frac{4 D_d \rho_d}{3 C_W \bar{\rho}} |\vec{\mathcal{V}}_{\text{rel.}}| \quad (4.20)$$

4.2 Modellierung mit Phasenübergang

Mehrphasensysteme, die zusätzlich zu den in Kapitel 4.1.1 und 4.1.2 beschriebenen Kraftwirkungen durch einen oder mehrere Phasenübergänge gekennzeichnet sind, spielen in der Energie- und Verfahrenstechnik eine bedeutende Rolle. Als Beispiel seien hier die Gasturbine und der Verbrennungsmotor genannt. Dort finden nacheinander die Prozesse Zerstäubung, Verdampfung und Verbrennung von flüssigen Brennstoffen statt. Zur vollständigen Beschreibung solch komplexer Vorgänge ist es notwendig, die wesentlichen Strömungsgebiete im Hinblick auf die jeweils vorherrschenden physikalischen Phänomene abgrenzend zu beschreiben. Dabei lassen sich folgende Zuordnungen vornehmen [82]:

1. Ausbildung von Tropfen durch den Zerfall des aus der Einspritzdüse austretenden Freistrahls.
2. In der Nähe der Düse herrscht eine dichte Mehrphasenströmung vor, bei der die Tropfenbewegung maßgeblich durch Partikel-Partikel-Interaktionen (Kollisionen und Koaleszenzbildung) gekennzeichnet ist.
3. Im weiteren Verlauf stromab der Düse bildet sich eine dünne Mehrphasenströmung aus, die in der Hauptsache durch fluiddynamische Kraftwirkungen dominiert wird.
4. Im Bereich von Strömungsberandungen / Wänden ist die Strömung durch Partikel-Wand-Interaktionen charakterisiert (Deposition, vollständige Reflektion, Aufteilung eines Tropfens in mehrere kleine Tropfen).

In der ingenieurtechnischen Praxis geben numerische Verfahren Hilfestellungen bei der Auslegung solcher Prozesse. Dies setzt jedoch voraus, dass die genannten Strömungsbereiche hinsichtlich ihrer physikalischen Eigenschaften ausreichend erfasst werden können. Die Anwendung des im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Euler-Lagrange-Verfahrens setzt insbesondere eine verdünnte Mehrphasenströmung voraus, so dass dieser Bereich, in dem die Tropfenbewegung durch fluiddynamische Krafteinwirkungen charakterisiert wird, im Fokus der Betrachtungen steht. Die im Folgenden behandelten Phasenübergänge bestehen im Wesentlichen aus Verdampfungsvorgängen von Gas-Flüssigkeitssystemen. Dabei wird die Massen- und Energiebilanz sowohl für die Tropfenphase, als auch über die Phasengrenzfläche hinweg betrachtet (nach [82, S. 105 ff.]).

4.2.1 Verdampfung flüssiger Einzeltropfen

Wird ein Flüssigkeitstropfen in eine Gasumgebung von höherer Temperatur gebracht, geht eine geringe Menge der Flüssigkeit durch Diffusion in die Gasphase über. Im Inneren des Tropfens liegt während der Aufwärmphase eine räumlich und zeitlich variierende Temperaturverteilung vor, wobei die Maximaltemperatur an der Tropfenoberfläche vorliegt. Es besteht sowohl ein Temperaturgradient zwischen der Tropfenoberfläche und dem Tropfeninneren als auch zwischen

Tropfenoberfläche und umgebender Gasströmung. Dieser Zustand ist schematisch in Abb. 4.1 dargestellt. Zudem ist daraus ersichtlich, dass nicht nur ein Temperaturgradient, sondern auch ein Konzentrationsgradient vorliegt, welcher zur Verdampfung beiträgt. Zur Verdeutlichung dessen ist der den Tropfen umgebende Film in Abb. 4.1 etwas asymmetrisch angeordnet.

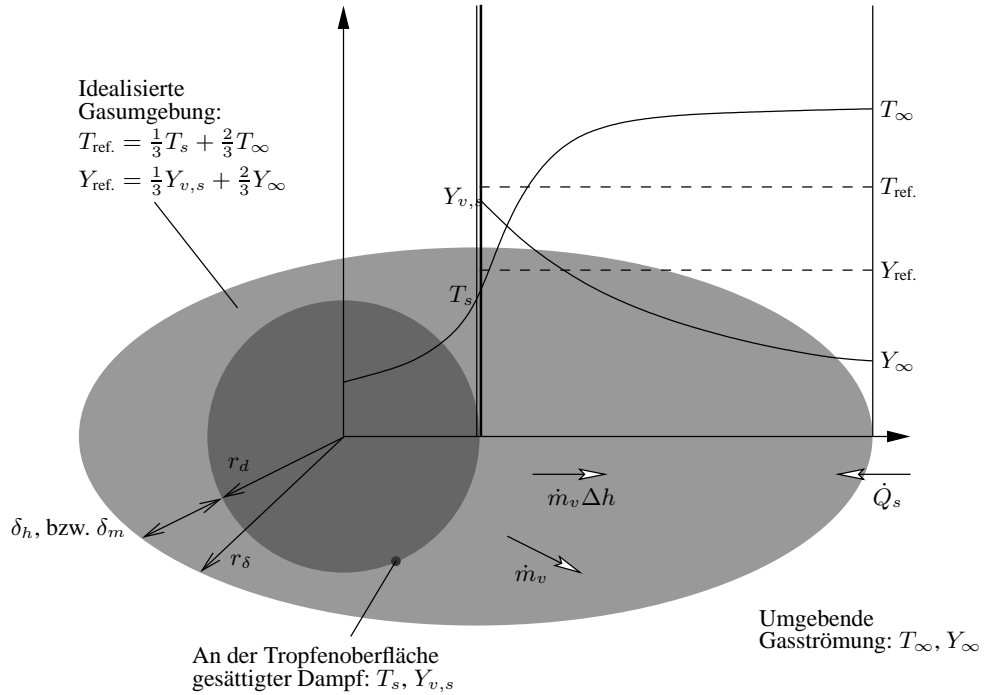


Abbildung 4.1: Filmmodell nach Nernst (1904): Schematische Darstellung des Temperatur- und Konzentrationsverlaufs

Der Konzentrationsunterschied entspricht der Differenz zwischen dem Dampfdruck unmittelbar an der Tropfenoberfläche und dem Partialdruck des verdampfenden Stoffes im umgebenden Strömungsmedium. Da im Folgenden nur Gleichgewichts-Verdampfungsmodelle betrachtet werden, wird angenommen, dass sich der Phasenwechsel schneller vollzieht, als sich die Transportvorgänge in der Gasphase abspielen. An der Tropfenoberfläche (Subskript s) ist die Verdampfung immer im thermodynamischen Gleichgewicht und der entstandene Dampf hat hier den Sättigungsdruck $p_{\text{sat.}}(T_s)$, der zur herrschenden Tropfentemperatur gehört. Dieser Dampfdruck ergibt sich aus der Clausius-Clapeyron-Beziehung:

$$\frac{dp_{\text{sat.}}}{dT} = \frac{(h'' - h')}{T(v'' - v')} \quad (4.21)$$

Hierbei stellt $\Delta h_v(T) = h'' - h'$ die Verdampfungsenthalpie dar. Des Weiteren wird angenommen, dass $v'' \gg v'$ gilt, wobei v'' für ein ideales Gas beschrieben werden kann. Unter der

Annahme, das für nicht allzu große dT die Verdampfungsenthalpie keine Funktion der Temperatur ist und somit $\Delta h_v = \text{konst}$ gesetzt werden kann, ergibt sich nach Trennung der Variablen und einer Integration folgende Gleichung zur Bestimmung des Dampfdrucks an der Tropfenoberfläche:

$$\ln \frac{p_{\text{sat.}}(T)}{p_{\text{sat.}}(T_{\text{ref.}})} = \frac{\mathcal{M}_v \Delta h_v}{\bar{R}} \left(\frac{1}{T_{\text{ref.}}} - \frac{1}{T} \right) \quad (4.22)$$

Hierbei ist $T_{\text{ref.}}$ eine (bekannte) Referenztemperatur, bei der der Dampfdruck $p_{\text{sat.}}(T_{\text{ref.}})$ herrscht. \bar{R} ist die universelle Gaskonstante. Der so ermittelte Dampfdruck wird dem Partialdruck des verdampfenden Mediums an der Oberfläche, $p_{v,s}$, gleichgesetzt und damit der Molenbruch

$$x_{v,s} = \frac{p_{\text{sat.}}(T)}{p_{\infty}} = \frac{p_{v,s}}{p_{\infty}}, \quad (4.23)$$

bzw. der Massenbruch des verdampfenden Mediums

$$Y_{v,s} = \frac{x_{v,s} \mathcal{M}_v}{x_{v,s} \mathcal{M}_v + (1 - x_{v,s}) \mathcal{M}_a} \quad (4.24)$$

berechnet. Hierbei entspricht $p_{\text{sat.}}(T_{\text{ref.}}) = p_{\infty}$. \mathcal{M}_v bezeichnet die Molmasse des verdampfenden Stoffes und ist mit \mathcal{M}_a aus Kapitel 2.2.2 gleichzusetzen. \mathcal{M}_a ist die Molmasse des Trärgases (hier: Luft).

Mit zunehmender Temperatur steigt der Dampfdruck der Flüssigkeit und damit die Dampfkonzentration an der Tropfenoberfläche. Dies hat einen höheren Stofftransport von der Tropfenoberfläche in die umgebende Gasphase zur Folge. Daraus ergibt sich zum einen, dass ein immer größer werdender Anteil der zugeführten Wärmemenge als Verdampfungsenthalpie zur Verfügung steht. Zum anderen wird durch den radialen Dampfstrom (genannt Stefan-Strom - siehe Abschnitt 4.2.3) der Wärmedurchgang durch die Grenzschicht behindert, was einen nur noch geringen Anstieg der Oberflächentemperatur zur Folge hat und zu einer Angleichung der inneren Tropfentemperatur führt. Somit erhält man beim Erreichen der Siedetemperatur einen Gleichgewichtszustand, der durch eine Gleichgewichtstemperatur an der Tropfenoberfläche charakterisiert ist.

4.2.2 Bilanzgleichung für Tropfenmasse und -energie

Zur Beschreibung des Verdampfungsprozesses geht man von den Erhaltungsgleichungen für Masse und Energie in integraler Form aus. Die Herleitung dieser Gleichungen kann verschiedenen Grundlagenbüchern entnommen werden und ist daher hier nicht weiter behandelt. Die Erhaltung der Masse wird durch

$$\dot{m}_v = \frac{d}{dt} \left(\frac{\pi}{6} \rho_d D_d^3 \right) \quad (4.25)$$

gewährleistet, die der Energie durch

$$\dot{Q}_d = \frac{d}{dt} \left(\frac{\pi}{6} c \rho_d D_d^3 T_s \right) \quad (4.26)$$

beschrieben, wobei D_d den Durchmesser und T_s die Temperatur des Tropfens an dessen Oberfläche kennzeichnen. Somit ergeben sich die folgenden Beziehungen zur Beschreibung der zeitlichen Änderung des Tropfendurchmessers und der Tropfentemperatur entlang einer individuellen Tropfenbahn wie folgt zu

$$\frac{dD_d}{dt} = \frac{2\dot{m}_v}{\pi \rho_d D_d^2}, \quad (4.27)$$

$$\frac{dT_s}{dt} = \frac{\dot{Q}_d}{m_d c}. \quad (4.28)$$

Die Modellierung des Verdampfungsprozesses besteht nun im Wesentlichen darin, die Verdampfungsrate \dot{m}_v und den Wärmestrom \dot{Q}_d durch die Phasengrenzfläche [...] zu beschreiben [82]. Dabei unterscheiden sich die existierenden Tropfenmodelle nach der Art und Weise, wie sie Wärmeleitung und Diffusion behandeln. Es existieren folgende Gruppen:

- „rapid-mixing“-Modelle:

Die Wärmeleitfähigkeit der Tropfenflüssigkeit wird als unendlich groß angenommen. Die Tropfentemperatur im Inneren des Tropfens ist somit homogen. Für den Fall, dass der Tropfen aus einem reinen Stoff besteht, wird dieses Modell als „uniform-temperature“-Modell bezeichnet.

- „conduction-limit“-Modelle:

Der radiale Konzentrations- und Temperaturverlauf im Inneren des Tropfens wird durch die Lösung einer diskretisierten Wärmeleitungs- und Diffusionsgleichung bei gleichzeitiger Vernachlässigung der konvektiven Strömung erhalten. Die resultierende Matrixgleichung ist für jeden Zeitschritt simultan zur Integration der Tropfenbahn zu lösen.

Um eine gewisse Flexibilität bei der Simulation der diffusions- und konvektions-kontrollierten Stadien während des Verdampfungsprozesses zu ermöglichen, ohne jedoch den Aufwand zu betreiben, die radiale Wärmeleitung im Tropfeninneren aufzulösen, entstand eine auf dem „conduction-limit“-Ansatz basierende Variante, welche die konvektiven Strömungen im Tropfeninneren berücksichtigt und dabei effektive (im Sinne von erhöhte) Werte für die Wärmeleitfähigkeit und den Diffusionskoeffizienten verwendet (Abramzon & Sirignano [1]). Dieses Modell bezeichnet sich nach Kohnen [82] als „effective-conduction-limit“-Modell.

Da das „uniform-temperature“-Modell den geringsten numerischen Aufwand aufweist, soll es im Rahmen eines LES-basierten Euler-Lagrange-Verfahrens Verwendung finden und im Folgenden näher beschrieben werden.

4.2.3 Die Filmtheorie am Beispiel des „uniform-temperature“-Modells

Der ideale Fall eines in einer ruhenden Umgebung verdampfenden Tropfens ist in der Realität nur selten anzutreffen. Vielmehr befindet sich der Tropfen in einer Relativbewegung zum umgebenden Strömungsmedium. Dadurch spielen konvektive Transportvorgänge zwischen Tropfen

und dem umgebenden Strömungsmedium eine nicht vernachlässigbare Rolle. Dieser Einfluss wird durch die Filmtheorie, welche ursprünglich von Nernst [128] entwickelt wurde, berücksichtigt. In dieser wird der Widerstand gegen Stoff- und Wärmeaustausch jeder Phase als ein Film konstanter Dicke δ angenommen (siehe Abb. 4.1). Zur Bestimmung dieser Filmdicke sind für Verdampfungsprozesse zwei Zustände zu unterscheiden [82]:

- Die Filmdicke δ , die sich beim Wärme-, bzw. Stoffübergang für einen schwach-verdampfenden (Subskript 0), kugelförmigen Tropfen ergibt:

$$\delta_{h_0} = \frac{2 r_d}{Nu_0 - 2}, \quad \text{für den Wärmeübergang} \quad (4.29)$$

$$\delta_{m_0} = \frac{2 r_d}{Sh_0 - 2}, \quad \text{für den Stoffübergang} \quad (4.30)$$

Hierbei bezeichnen Nu_0 und Sh_0 die Nusselt- und Sherwoodzahl für eine schwach-verdampfende Kugel. Für diese Kennzahlen gibt es in der Literatur eine Reihe von Korrelationen. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Gleichungen nach Frössling [51] verwendet:

$$Nu_0 = 2 + 0,552 Re_d^{1/2} Pr^{1/3} \quad (4.31)$$

$$Sh_0 = 2 + 0,552 Re_d^{1/2} Sc^{1/3} \quad (4.32)$$

Für die hier verwendete Tropfen-Reynoldszahl Re_d gilt eine etwas modifizierte Form der Gl. (2.9):

$$Re_d = \frac{\bar{\rho} D_d |\vec{V}_{rel.}|}{\bar{\mu}_m} \quad (4.33)$$

Für die Prandtl- und die Schmidt-Zahl gilt:

$$Pr = \frac{\bar{\mu}_m \bar{c}_{p,m}}{\bar{\lambda}_m} \quad (4.34)$$

$$Sc = \frac{\bar{\nu}_m}{\bar{D}_m} \quad (4.35)$$

(Hinsichtlich der Bestimmung der Stoffeigenschaften siehe den nächsten Abschnitt 4.2.3.1)

- Die Filmdicke δ , die sich durch den konvektiven Transport des verdampfenden Stoffes durch die Konzentrations- und Temperaturgrenzschicht um den Tropfen ergibt. Dieser Konvektionsstrom, der zu einer Erhöhung der Filmdicke δ im Vergleich zu einem schwach-verdampfenden Tropfen führt, wird als Stefan-Strom bezeichnet. Formal wird der Einfluss des Stefan-Stroms durch modifizierte Nusselt- und Sherwoodzahlen ($Nu_{eff.}$ und $Sh_{eff.}$) wiedergegeben, so dass man im Falle von Verdampfung folgende Zusammenhänge für die Filmdicken erhält:

$$\delta_h = \frac{2 r_d}{Nu_{eff.} - 2}, \quad \text{für den Wärmeübergang} \quad (4.36)$$

$$\delta_m = \frac{2 r_d}{Sh_{eff.} - 2}, \quad \text{für den Stoffübergang} \quad (4.37)$$

Mit den klassischen Definitionen für die aktuelle Nusselt- und Sherwoodzahl

$$Nu = -\frac{2r_d}{(T_s - T_\infty)} \left(\frac{dT}{dr} \right) \Big|_s \quad (4.38)$$

$$Sh = -\frac{2r_d}{(Y_{v,s} - Y_\infty)} \left(\frac{dY_v}{dr} \right) \Big|_s \quad (4.39)$$

bestehen folgende mathematische Beziehungen zwischen den einzelnen Kennzahlen:

$$Nu_0 \geq Nu_{\text{eff.}} \geq Nu \quad (4.40)$$

$$Sh_0 \geq Sh_{\text{eff.}} \geq Sh \quad (4.41)$$

Das Ziel im Hinblick auf die gesuchte Verdampfungsrate \dot{m}_v und den Wärmestrom durch die Phasengrenzfläche \dot{Q}_d besteht nun darin, mathematische Beziehungen zwischen Nu_0 und $Nu_{\text{eff.}}$ und zwischen Sh_0 und $Sh_{\text{eff.}}$ zu finden, so dass die Anwendung der Gleichungen (4.31) und (4.32) möglich wird.

4.2.3.1 Verdampfungsrate

Nachdem nun die wesentlichen Kennzahlen, die bei der Beschreibung des Verdampfungsprozesses zu berücksichtigen sind, betrachtet wurden, ist es möglich die mathematische Beziehung für die Verdampfungsrate zu beschreiben [82, S. 109-111]. Betrachtet man (s. Abb. 4.1) eine sphärische Kontrollfläche mit dem Radius r , so dass $r_d < r < r_\delta$ gilt, dann erhält man den Stoffstrom des verdampfenden Mediums in einer Gasumgebung durch diese Oberfläche durch

$$J_v = 4\pi r^2 j_m = 4\pi r^2 \left[\underbrace{-\bar{\rho}_m \bar{D}_m \frac{dY_v}{dr}}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\bar{\rho}_m \bar{u}_{r,m} Y_v}_{\text{Konvektion}} \right]. \quad (4.42)$$

Dabei stellt j_m den spezifischen Stoffstrom des Dampf-Luft-Gemisches an der Tropfenoberfläche, Y_v den Massenbruch der Dampfphase, $\bar{u}_{r,m}$ die Radialgeschwindigkeit des Gemisches (Stefan-Strom), $\bar{\rho}_m$ die Dichte des Gemisches und \bar{D}_m den binären Diffusionskoeffizienten der verdampfenden Flüssigkeit in Luft dar. Unter stationären Bedingungen und unter Berücksichtigung der Tatsache, dass der Nettomassenstrom der Luft durch die Kontrolloberfläche Null ist, folgt die Gleichheit des Stoffstroms aus Gl. (4.42) und der Verdampfungsrate $J_v = \dot{m}_v = 4\pi r^2 \rho_m u_{r,m}$. Man erhält

$$J_v = -\frac{4\pi r^2 \bar{\rho}_m \bar{D}_m}{1 - Y_v} \cdot \frac{dY_v}{dr} = \dot{m}_v = \text{konst.} \quad (4.43)$$

Nach Trennung der Variablen und Integration über die Filmdicke folgt:

$$\dot{m}_v = 2\pi r_d \bar{\rho}_m \underbrace{\bar{D}_m \frac{2r_\delta}{\delta_m}}_{Sh_{\text{eff.}}} \ln \frac{1 - Y_{v,s}}{1 - Y_v} \quad (4.44)$$

Nach Einführung einer Kennzahl B_M , die die Triebkraft des Verdampfungsprozesses darstellt³⁾ und der im Folgenden verwendeten Konvention $Y_v = Y_\infty = Y$, ($T_\infty = T$),

$$B_M = \frac{Y_{v,s} - Y_\infty}{1 - Y_{v,s}}, \quad (4.45)$$

erhält man einen Ausdruck für die Verdampfungsrate wie folgt:

$$\dot{m}_v = 2 \pi r_d \bar{\rho}_m \bar{D}_m Sh_{\text{eff.}} B_M \quad (4.46)$$

$\bar{\rho}_m$ und \bar{D}_m stellen jeweils die über die Filmdicke gemittelten Werte für die Dichte des Gemisches und des binären Diffusionskoeffizienten dar. Beide Größen haben einen starken Einfluss auf die Verdampfungsrate. Diese und auch andere Stoffeigenschaften des Gemisches sind von der Temperatur und den jeweiligen Massenanteilen abhängig. Die Stoffeigenschaften werden nach einem Vorschlag von Hubbard et al. [71] nach der von Sparrow & Gregg [186] eingeführten sogenannten 1/3-Regel bestimmt, so dass die Stoffeigenschaften mit folgenden Referenzgrößen zu bilden sind:

$$T_{\text{ref.}} = T_s + \frac{1}{3}(T_\infty - T_s) \quad (4.47)$$

$$Y_{\text{ref.}} = Y_{v,s} + \frac{1}{3}(Y_\infty - Y_{v,s}) \quad (4.48)$$

Gl. (4.46) lässt die Frage offen, wie die modifizierte Sherwoodzahl $Sh_{\text{eff.}}$ bestimmt werden kann. Das Ergebnis der Gl. (4.46) muss wegen der Unabhängigkeit vom Radius r gleich der Verdampfungsrate an der Oberfläche des Tropfens sein. Dieser Stoffstrom ist durch Gl. (4.43) gegeben. Unter der Annahme, dass die effektive Sherwoodzahl für den Fall eines schwach verdampfenden Tropfens bekannt ist und mit dem Subskript 0 bezeichnet wird und der Definition von B_M (Gl. (4.45)) erhält man

$$\dot{m}_v = 2 \pi r_d \bar{\rho}_m \bar{D}_m Sh_0 \ln(1 + B_M). \quad (4.49)$$

Ein Vergleich der Gleichungen (4.46) und (4.49) liefert den Zusammenhang zwischen $Sh_{\text{eff.}}$ und Sh_0 :

$$Sh_{\text{eff.}} = Sh_0 \frac{\ln(1 + B_M)}{B_M} \quad (4.50)$$

4.2.3.2 Wärmestrom durch die Phasengrenzfläche

Analog zur Berechnung des Stoffstroms wird von der Enthalpiebilanz ausgegangen [82, S. 111-112]. Der Gesamtwärmestrom von der Umgebung in das Tropfeninnere durch die Kontrollfläche ist gegeben durch

$$\dot{Q} = -4 \pi r^2 \bar{\lambda}_m \frac{dT}{dr} + \dot{m}_v h_v(T). \quad (4.51)$$

³⁾engl.: Spalding mass transfer number

Dabei ist $\bar{\lambda}_m$ die über die Filmdicke gemittelte Wärmeleitfähigkeit und $h_v(T)$ die Enthalpie des trocken-gesättigten Dampfes, wobei

$$\dot{m}_v h_v(T) = \dot{m}_v (h_v''(T_s) + \bar{c}_{p,v}(T - T_s)) \quad (4.52)$$

gilt. $h_v''(T_s)$ ist die Enthalpie des Dampfes bei der Siedetemperatur und $\bar{c}_{p,v}$ ist die über die Filmdicke gemittelte spezifische Wärmekapazität der verdampfenden Substanz. Da auch der Wärmestrom unabhängig von der radialen Position im Film ist, muss er gleich dem Wärmestrom an der Oberfläche sein, der durch

$$\dot{Q}_s = \dot{m}_v h_v'(T_s) - \dot{Q}_d \quad (4.53)$$

gegeben ist. $h_v'(T_s)$ stellt hierbei die Enthalpie der flüssigen Phase bei Siedetemperatur und \dot{Q}_d den Wärmestrom durch die Phasengrenzfläche ins Innere des Tropfens dar. Unter Verwendung der Verdampfungsenthalpie $\Delta h_v(T_s) = h_v''(T_s) - h_v'(T_s)$ führt ein Gleichsetzen der Gleichungen (4.51) und (4.53) mit anschließender Integration über die Filmdicke zur nachfolgenden Gleichung

$$\frac{\dot{m}_v \bar{c}_{p,v}}{2 \pi r_d \bar{\lambda}_m} = \ln \left[1 + \frac{\dot{m}_v \bar{c}_{p,m}(T - T_s)}{\dot{m}_v \Delta h_v(T_s) + \dot{Q}_d} \right]. \quad (4.54)$$

Wird Gl. (4.54) nach \dot{Q}_d aufgelöst und verwendet man Gl. (4.36), erhält man den gesuchten Wärmestrom

$$\dot{Q}_d = 2 \pi r_d \bar{\lambda}_m Nu_{\text{eff.}}(T - T_s) - \dot{m}_v \Delta h_v(T_s). \quad (4.55)$$

Gl. (4.55) lässt die Frage offen, wie die modifizierte Nusseltzahl $Nu_{\text{eff.}}$ bestimmt werden kann. Das Ergebnis von Gl. (4.55) muss wegen der Unabhängigkeit vom Radius r gleich dem Wärmestrom an der Oberfläche des Tropfens sein. Dieser Strom ist durch Gl. (4.53) gegeben. Unter der Annahme, dass die effektive Nusseltzahl für den Fall eines schwach verdampfenden Tropfens bekannt ist und mit dem Subskript 0 bezeichnet wird und der Definition

$$K_H = \frac{\dot{m}_v \bar{c}_{p,m}}{2 \pi r_d \bar{\lambda}_m Nu_0} \quad (4.56)$$

erhält man

$$\dot{Q}_d = 2 \pi r_d \bar{\lambda}_m Nu_0 \frac{K_H}{\exp^{K_H} - 1} (T - T_s) - \dot{m}_v \Delta h_v(T_s), \quad (4.57)$$

Der Wärmestrom auf die Tropfenoberfläche \dot{Q}_s ist gegeben durch

$$\dot{Q}_s = 2 \pi r_d \bar{\lambda}_m Nu_0 \frac{K_H}{\exp^{K_H} - 1} (T - T_s). \quad (4.58)$$

Ein Vergleich der Gleichung (4.58) mit der Gleichung (4.57) liefert den Zusammenhang zwischen $Nu_{\text{eff.}}$ und Nu_0 :

$$Nu_{\text{eff.}} = Nu_0 \frac{K_H}{\exp^{K_H} - 1} \quad (4.59)$$

Somit sind alle Größen zur Beschreibung der Tropfenverdampfung bestimmt. Im Hinblick auf das verwendete „uniform-temperature“-Modell und der enthaltenen Annahme einer homogenen Tropfentemperatur wird im Folgenden die Oberflächentemperatur gleich der Tropfentemperatur $T_s = T_d$ gesetzt.

4.2.4 Tropfengrößenabnahme

Wird ein kalter Tropfen in eine heiße Gasströmung eingebracht, wird dieser stark erwärmt. Dies hat eine leichte Ausdehnung während der Aufwärmphase zur Folge, die im Folgenden mitberücksichtigt werden soll. Für den Tropfendurchmesser D_d gilt in Abhängigkeit der Tropfenmasse m_d und der Tropfendichte ρ_d

$$D_d = \frac{6 m_d}{\pi \rho_d}. \quad (4.60)$$

m_d ist aufgrund der Verdampfung explizit zeitabhängig, ρ_d ist über die Tropfentemperatur T_d indirekt von der Zeit abhängig. Mit der Annahme einer homogenen Tropfentemperatur (vgl. vorigen Abschnitt) gilt gleiches auch für die Dichte im Tropfen. Somit wird:

$$\frac{dD_d}{dt} = \frac{\partial D_d}{\partial m_d} \frac{dm_d}{dt} + \frac{\partial D_d}{\partial \rho_d} \frac{\partial \rho_d}{\partial T_d} \frac{dT_d}{dt} \quad (4.61)$$

Darin ist

$$\frac{dm_d}{dt} = -\dot{m}_v \quad (4.62)$$

der in Kapitel 4.2.3.1 hergeleitete Massenstrom der verdampfenden Flüssigkeit. $\partial \rho_d / \partial T_d$ ist eine Stoffeigenschaft, dT_d/dt beschreibt die Tropfenerwärmung (Gl. (4.28)). Die Ausdifferenzierung von $\partial D_d / \partial m_d$ und $\partial D_d / \partial \rho_d$ mit Hilfe von Gl. (4.60) ergibt schließlich

$$\frac{dD_d}{dt} = -\frac{2 \dot{m}_v}{\pi \rho_d D_d^2} - \frac{D_d}{3 \rho_d} \frac{\partial \rho_d}{\partial T_d} \frac{dT_d}{dt}. \quad (4.63)$$

4.2.5 Verifikation - Verdampfung eines Einzeltropfens in ruhender Umgebung

Zur Überprüfung einer korrekten Implementierung sind in Abb. 4.2 und 4.3 die Ergebnisse einer numerischen Simulation der Verdampfung eines ruhenden Dekan-Tropfens in einer ruhenden Heißgasatmosphäre dargestellt. Hierbei beträgt der Tropfendurchmesser $D_{d,0} = 100 \cdot 10^{-6}$ m und die Tropfentemperatur $T_{d,0} = 300$ K. In der Tropfenumgebung herrscht eine Temperatur von $T_\infty = 800$ K sowie ein Druck von $p_\infty = 1$ bar. Zum Vergleich der zeitlichen Entwicklung des Tropfendurchmessers und der Tropfentemperatur wurden Ergebnisse einer Simulation von Schmehl [161] herangezogen.

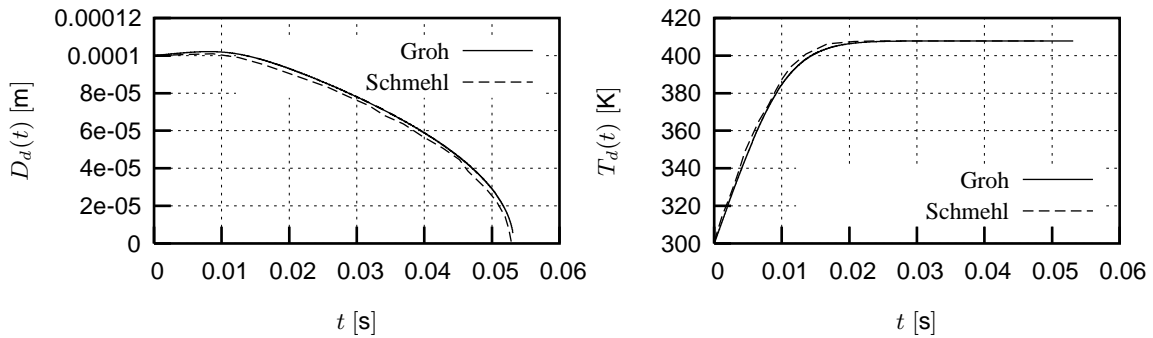


Abbildung 4.2: Verdampfung eines Dekan-Tropfens in ruhender Umgebung: Abnahme des Durchmessers (linkes Bild) und Verlauf der Tropfentemperatur (rechtes Bild)

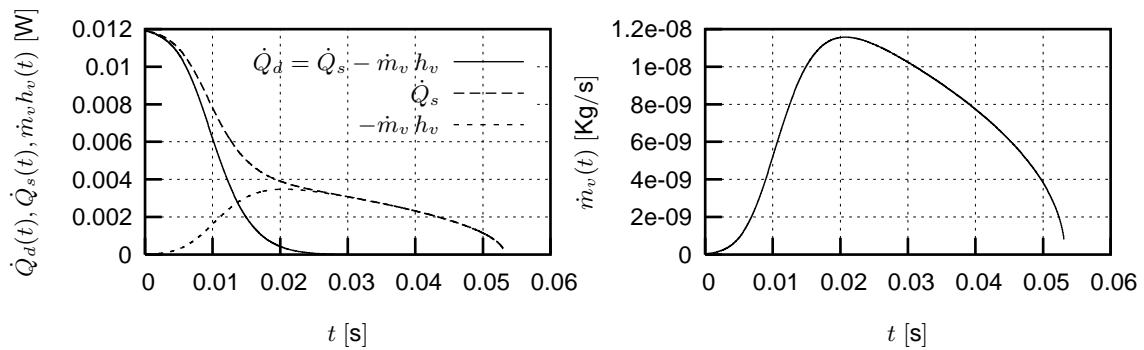


Abbildung 4.3: Verdampfung eines Dekan-Tropfens in ruhender Umgebung: Verlauf der Wärmeströme (linkes Bild) und Verlauf der Verdampfsrate (rechtes Bild)

Das „uniform-temperature“-Modell beschreibt den Fall eines sofortigen Temperatúrausgleichs im Tropfen. Mit der Aufheizung des Tropfens beginnt an seiner Oberfläche der Verdampfungsprozess. Der Flüssigkeitsdampf diffundiert aufgrund des Konzentrationsgefälles entgegen des Wärmestroms von der Tropfenoberfläche in die Gasumgebung. Die Aufheizung des Tropfens ist in dem gewählten Beispiel nach zirka $t = 0,025$ s beendet. Ab diesem Zeitpunkt herrscht in der Gasumgebung an der Tropfenoberfläche ein Gleichgewicht zwischen dem zugeführten Wärmestrom \dot{Q}_s und dem vom Tropfen abgehenden Enthalpiestrom $\dot{m}_v \Delta h_v$. Bei dieser Tropfentemperatur, der sogenannten Gleichgewichtstemperatur, welche sich zu $407,7$ K bestimmt, wird die gesamte zugeführte Wärmemenge zur Verdampfung aufgewendet. Die Tropfentemperatur bleibt dann bis zur vollständigen Verdampfung des Tropfens konstant.

Die Abnahme der Flüssigkeitsdichte durch die Temperaturzunahme hat in diesem Beispiel eine leichte Zunahme des Tropfenvolumens in der Aufheizphase zur Folge (linkes Bild in Abb. 4.2).

4.3 Phasenwechselwirkung

In den folgenden Abschnitten wird sowohl die Behandlung des Einflusses der Trägergasphase auf die Partikelbewegung, als auch das Vorhandensein der dispersen Phase und deren Wirkung auf das Trägergas beschrieben.

4.3.1 Einfluss der Fluidturbulenz auf die Partikelbewegung

In Gleichung (4.18), die in den vorhergehenden Kapiteln für die Berechnung der Partikelbewegung angegeben wurde, wurde für die Fluidgeschwindigkeit jeweils als Platzhalter eine charakteristische Geschwindigkeit eingesetzt. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Trägergasströmung mittels der Methode der LES berechnet, so dass die Fluidgeschwindigkeit durch die am Ort des Partikels vorherrschende, durch die LES aufgelöste, momentane Geschwindigkeit zu ersetzen ist; in Strömungen mit einem Phasenübergang der dispersen Phase ist entsprechend T durch die momentan, vorherrschende Temperatur \tilde{T} und Y durch den momentan vorliegenden Massenbruch \tilde{Y} zu ersetzen.

Bewegt sich ein Partikel in einer turbulenten Strömung, so ist die Partikelbewegung jedoch nicht nur von der momentanen Geschwindigkeitsbelegung der kontinuierlichen Phase abhängig, sondern auch von den turbulenten Schwankungsgeschwindigkeiten. In Abhängigkeit von der lokalen Turbulenzintensität werden insbesondere im Vergleich zu den charakteristischen turbulenten Längenmaßen kleine Partikel stark von der turbulenten Schwankungsbewegung beeinflusst, was zu einer verstärkten turbulenten Dispersion der Partikel führt. [48]

Um diesen Effekt auf die Partikelbewegung zu berücksichtigen, wird hier ein Lagrange'scher stochastisch-deterministischer Modellansatz (LSD-Modell)⁴⁾ von Sommerfeld et al. [180] in etwas abgewandelter, in einer für die Anwendung der Methode der LES übertragenen Form verwendet. Hierbei werden in den Bewegungsgleichungen für das Partikel (4.18) die Geschwindigkeiten U_1 , U_2 und U_3 durch die Momentangeschwindigkeiten der Fluidströmung $U_{1,\text{mom.}}$, $U_{2,\text{mom.}}$ und $U_{3,\text{mom.}}$ ersetzt:

$$U_{1,\text{mom.}} = \tilde{u}_1 + u_1^{\text{sgs}}, \quad U_{2,\text{mom.}} = \tilde{u}_2 + u_2^{\text{sgs}}, \quad U_{3,\text{mom.}} = \tilde{u}_3 + u_3^{\text{sgs}}. \quad (4.64)$$

Die Schwankungsgeschwindigkeiten u_1^{sgs} , u_2^{sgs} , u_3^{sgs} werden dabei unter Annahme isotroper Turbulenz mit Hilfe eines stochastischen Verfahrens bestimmt. Die Schwankungsgeschwindigkeiten sind Zufallsgrößen, die einer Gaußverteilung mit dem Mittelwert von 0 [m/s] und einem „rms“-Wert von

$$\sigma_{u_i} = \sqrt{2 k^{\text{sgs}}/3}, \quad \sigma_{u_i} = u_1^{\text{sgs}} = u_2^{\text{sgs}} = u_3^{\text{sgs}} \quad (4.65)$$

unterliegen, wobei k^{sgs} die turbulente kinetische Feinstrukturenergie des Fluids ist. Diese kann aus einem Ansatz von Lilly (Gl. (3.117)) abgeschätzt, oder durch die im Rahmen dieser Arbeit

⁴⁾Derartige Modelle zur Beschreibung der Interaktion eines Partikels mit der Turbulenz der Fluidströmung werden in der englischsprachigen Literatur auch als „discrete-eddy model“ oder als „particle-eddy-interaction model“ bezeichnet (nach [48]).

implementierte Transportgleichung (Gl. (3.39)) direkt erhalten werden. Nach Berechnung der Schwankungsgeschwindigkeiten werden die Bewegungsgleichungen für das Partikel, bzw. der Tropfen in Abhängigkeit von den Fluidmomentangeschwindigkeiten gelöst und so die Partikelbewegung unter dem Einfluss der Fluidturbulenz berechnet.

Die Berechnung dieser zufälligen Schwankungsgeschwindigkeiten ist nach [48] dabei gleichbedeutend mit dem Generieren eines Turbulenzwirbels, den das Partikel auf seiner Bahn (Trajektorie) durchquert. Die Dauer des Zeitintervalls $\tau_{\text{int.}}$, für die das Partikel mit dem diskreten Turbulenzwirbel in Wechselwirkung steht, ist dabei durch zwei Faktoren begrenzt. Diese sind zum einen die Wirbellebensdauer $\tau_{\text{edd.}}$ und zum anderen die Durchgangszeit $\tau_{\text{tra.}}$, d. h. die Zeit, die das Partikel benötigt, um den turbulenten Wirbel zu durchqueren. Die Wirbellebensdauer bestimmt sich aus der Annahme, dass die Größe eines statistisch ausgewählten Wirbels das Dissipationslängenmaß ist und dieses proportional zur gewählten Filterweite $\bar{\Delta}$ der Grobstruktursimulation ist,

$$\tau_{\text{edd.}} = \frac{\bar{\Delta}}{\sqrt{2} k^{\text{sgs}}/3}. \quad (4.66)$$

Die Durchwanderungszeit eines Partikels durch diesen Wirbel wird wie folgt abgeschätzt

$$\tau_{\text{tra.}} = -\tau_d \ln \left[1 - \frac{\bar{\Delta}}{\tau_d |\vec{V}_{\text{rel.}}|} \right], \quad (4.67)$$

so dass sich die resultierende Partikelinteraktionszeit ergibt zu

$$\tau_{\text{int.}} = \begin{cases} \tau_{\text{edd.}} & : \bar{\Delta} > \tau_d |\vec{V}_{\text{rel.}}| \\ \min(\tau_{\text{tra.}}, \tau_{\text{edd.}}) & : \bar{\Delta} \leq \tau_d |\vec{V}_{\text{rel.}}| \end{cases}. \quad (4.68)$$

Das Konzept der diskreten turbulenten Wirbel zeichnet sich durch seine Einfachheit aus und hat seine Effizienz in Anwendungen auf komplexe Mehrphasenströmungen gezeigt [134, 158]. Trotzdem besitzt dieses Konzept auch eine Reihe von Nachteilen (nach [48]):

1. Die räumliche und zeitliche Korrelation der turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen der Fluidphase [...] wird nicht berücksichtigt.
2. Die Anisotropie der Turbulenz kann bei Verwendung der Isotropieannahme in Gl. (4.65) nicht berücksichtigt werden. Diese Beschränkung kann jedoch durch den Einsatz beispielsweise eines „scale-similarity“-Modellansatzes für die drei Komponenten der Feinstrukturvarianzen der Geschwindigkeit aufgehoben werden, wie von Miller & Bellan [119] gezeigt wurde.⁵⁾
3. Es wird keine Korrelation zwischen den einzelnen Komponenten der Fluidgeschwindigkeiten berücksichtigt.

⁵⁾Im gleichen Zuge wurden von Miller & Bellan im Rahmen der Tropfensimulation für die Abschätzung der Feinstrukturvarianzen der skalaren Größen Temperatur und Massenanteil der verdampfenden Phase dieser Ansatz vorgeschlagen.

Diese Nachteile des LSD-Modells haben in der Vergangenheit zur Entwicklung alternativer Modelle zur Berücksichtigung des Einflusses der Fluidturbulenz auf die Partikelbewegung geführt, von denen das bekannteste das Markov-Sequenz-Dispersionsmodell im Rahmen von RANS-basierten Partikel-Fluidströmungen darstellt (Chrigui et al. [18], Sommerfeld [179]). Aufgrund dessen, dass in RANS-Simulationen die Fluidgeschwindigkeiten nur als statistisch gemittelte Informationen zur Verfügung stehen, versucht dieses Dispersionsmodell die beschriebenen Nachteile durch eine entsprechende Modellierung aufzuheben. Nach [48] beschreibt dieses Partikel-Turbulenzmodell die Fluktuationsgeschwindigkeiten des Fluids entlang der Partikelbahn nicht länger als unkorrelierte Größen. Vielmehr wird ausgehend von der Partikelposition zum Zeitpunkt t^n die Bewegung des die Partikel umgebenden Fluidelements verfolgt und unter Verwendung einer Lagrange'schen Korrelationsfunktion die Fluktuationsgeschwindigkeiten des Fluids am Ort des Fluidelements zum Zeitpunkt t^{n+1} bestimmt. Um die Geschwindigkeitsfluktuationen am Ort des Fluidelements mit der am Ort des Partikels zum Zeitpunkt t^{n+1} zu korrelieren, wird ein zweiter Euler'scher Berechnungsschritt unter Verwendung der Euler'schen Korrelationskoeffizienten durchgeführt. Zusätzlich wird ein sogenannter Drift-Korrekturterm in die Gleichungen eingeführt, der die mittlere Drift der Partikel aus Gebieten höherer Turbulenz vermeiden soll. Im Ergebnis wird die Änderung der Fluktuationsgeschwindigkeiten des Fluids am Partikelort durch eine Markov-Sequenz beschrieben, bei der die Fluktuationsgeschwindigkeiten zum Zeitpunkt t^{n+1} von den Fluktuationsgeschwindigkeiten zum Zeitpunkt t^n abhängig sind, nicht jedoch von weiter zurückliegenden Ereignissen entlang der Partikeltrajektorie.

Aufgrund der Tatsache, dass zum einen die Anwendung der Markov-Sequenz innerhalb eines Zeitschrittes Δt sehr aufwendig ist, und zum anderen für LES-basierte Partikel-Fluidströmungen wenn auch gefilterte, so doch momentane Geschwindigkeiten vorliegen und turbulente, die Partikelbewegung beeinflussende Wirbel hinreichend aufgelöst werden sollten (die Abschätzung der Feinstrukturenergie in LES-Einphasen-Simulationen führt gemeinhin auf Werte von 10 - 15 %), ist die Anwendung eines komplexeren Dispersionsmodells nicht notwendig und die Verwendung des modifizierten LSD-Modells zur Beschreibung der Partikeldispersion im Rahmen dieser Arbeit gerechtfertigt.

4.3.2 Einfluss der dispersen Phase auf die Fluidströmung

Wie in Kapitel 2.1.4 [...] erwähnt, führt eine Erhöhung der Partikelbeladung [...] zu einer Beeinflussung der Fluidbewegung durch die Bewegung der Partikelphase. Hauptsächlich durch die Übertragung von Impuls von der fluiden auf die disperse Phase und umgekehrt aufgrund der wirkenden fluiddynamischen Kräfte - an erster Stelle sei hier die Widerstandskraft genannt - kommt es zu einer quantitativen und qualitativen Veränderung sowohl der mittleren Fluidströmung als auch der turbulenten Schwankungsbewegung des Fluids. In diesem Fall spricht man von einer Zwei-Wege-Kopplung zwischen den beteiligten Phasen. Für die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten verdampfenden Tropfen ergibt sich zusätzlich als weitere Art der Phasenwechselwirkung die Massen- und Wärmeübertragung. [48]

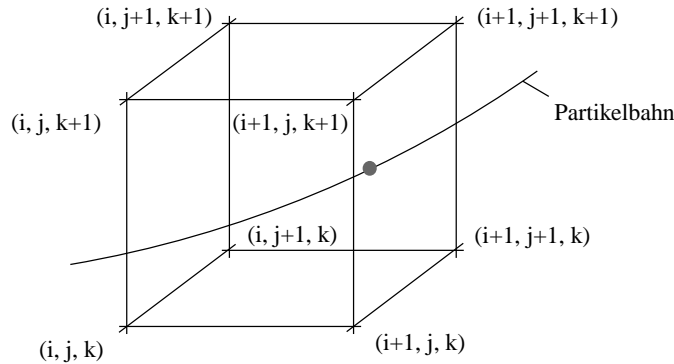


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung eines Partikels in einem finiten Kontrollvolumen $V_{i,j,k}$ des numerischen Gitternetzes.

4.3.2.1 Projektions-Modell

Das Projektions-Modell zur Berücksichtigung der Phasenwechselwirkung zwischen der fluiden und dispersen Phase im Rahmen des Euler-Lagrange-Verfahrens wurde von einer Reihe von Autoren erfolgreich angewandt [9, 10, 171, 188, 189, 193, 194, 195]. Das Grundprinzip dieses Modells basiert darauf, die einzelnen Partikel in der numerischen Simulation als Quellen bzw. als Senken in der Massen-, Impuls- und Energiebilanz bei der Berechnung der Fluidströmung zu berücksichtigen. Dazu werden in die Massen-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichung der fluiden Phase Phasenwechselwirkungsterme für die Massen-, Impuls- und Wärmeübertragung zwischen den Phasen eingeführt (Gleichungen (2.17), (2.18) und (2.20)).

Betrachtet man nun in Abbildung 4.4 die schematisch dargestellte Bewegung eines Partikels in dem numerischen Gitternetz, welches dem in Kapitel 3.2.2 erläuterten Finite-Volumen-Verfahren zugrunde liegt, so ergibt sich die durch die Partikelbewegung auf das Fluid (bzw. vice versa) übertragene Massen-, Impuls- und Energieänderung durch die Änderung der Partikelmasse, der Partikelgeschwindigkeit und der freigesetzten Wärme aufgrund der Partikelverdampfung (innerhalb eines Zeitschrittes Δt). In Abhängigkeit von der Lage des Partikels in Relation zu dem Kontrollvolumen und der Beachtung der Anordnung der Kontrollvolumina im Rahmen des verwendeten *staggered grid* (Kapitel 3.2.1) bezüglich der unterschiedlichen Behandlung der Skalar- und der Geschwindigkeitsgrößen, muss für jedes Partikel und jeden Sub-Zeitschritt im Rahmen des verwendeten dreistufigen Runge-Kutta-Zeitschrittverfahrens die Zuordnung dieser Anteile zum summarischen Massen-, Impuls- und Wärmeaustausch zu dem durch den Zellindex (i, j, k) ⁶ charakterisierten Kontrollvolumen erfolgen. Der integrale Austauschterm für den Massen- und für den Wärmeübergang sowie für den Impuls für das Kontrollvolumen $V_{i,j,k}$ wird dann durch Summation der Phasenwechselwirkungsanteile über alle Partikel, die das jeweilige Kontrollvolumen innerhalb eines Runge-Kutta Zeitschrittes durchqueren, ermittelt. Die

⁶Das Indextripel (i, j, k) charakterisiert die Lage des Kontrollvolumens in den drei topologischen Koordinatenrichtungen i, j und k innerhalb der Zellanordnung des numerischen Gitters.

Austauschtermen für den Massen- und Wärmeübergang sowie für den Impuls ergeben sich zu

$$\bar{S}_\rho = \sum_{l=1}^N \frac{w_{d,i,j,k,l} \dot{m}_{v,l} N_{d,l}}{V_{i,j,k}}, \quad (4.69)$$

$$\bar{S}_{u_i} = - \sum_{l=1}^N \left[\frac{w_{d,i,j,k,l} m_{d,l} N_{d,l}}{V_{i,j,k}} \frac{1}{\tau_{d,l}} \left(\tilde{u}_{i,l} + u_{i,l}^{\text{sgs}} - u_{d,i,l} \right) \right] + \sum_{l=1}^N \frac{w_{d,i,j,k,l} \dot{m}_{v,l} N_{d,l}}{V_{i,j,k}} u_{d,i,l}, \quad (4.70)$$

$$\bar{S}_h = - \sum_{l=1}^N \frac{w_{d,i,j,k,l} N_{d,l}}{V_{i,j,k}} \dot{Q}_{d,l} + \sum_{l=1}^N \frac{w_{d,i,j,k,l} \dot{m}_{v,l} N_{d,l}}{V_{i,j,k}} (c_{p,v,l} T_{d,l} + \Delta h_{v,l}). \quad (4.71)$$

Hierbei stellt $m_{d,l}$ die Masse eines individuellen, numerischen Partikels l , $\dot{m}_{v,l}$ die Masse, die ein Einzelpartikel aufgrund der Verdampfung innerhalb eines Runge-Kutta Zeitschrittes verliert, $N_{d,l}$ die Partikelanzahl entlang einer berechneten Partikeltrajektorie dar. $w_{d,i,j,k,l}$ sind Gewichtungsfaktoren, die die Lage des betrachteten individuellen Partikels im Kontrollvolumen berücksichtigen (siehe hierzu Kapitel 4.4.2).

4.3.2.2 Einfluss der Partikelbewegung auf die Fluidturbulenz

In Kapitel 4.3.1 wurden Modelle betrachtet, die die Beeinflussung der Partikelbewegung durch die turbulente Schwankungsbewegung der Fluidphase beschreiben. Das Vorhandensein und die Bewegung der Partikel im Strömungsfeld kann aber andererseits [...] eine Veränderung des Turbulenzfeldes selbst verursachen [48]. Trotz erheblicher Forschungsanstrengungen ist auf diesem Gebiet in den letzten Jahren noch keine einheitliche Auffassung darüber erkennbar, wie dieser Einfluss der Partikelbewegung auf die Turbulenz der Fluidströmung von Seiten der Modellbildung behandelt werden kann. Umfangreiche Untersuchungen hierzu stammen von Crowe [24], Gore und Crowe [24, 58, 59], Kulick et al. [87], Kohnen [82], Hetsroni [69] und Rashidi et al. [144].

Die bisher in der Literatur beschriebenen experimentellen und numerischen Untersuchungen zeigen, dass die Anwesenheit der Partikel sowohl zu einer Erhöhung als auch zu einer Dämpfung der Turbulenzintensität führen kann. Bezogen auf die charakteristischen turbulenten Längenmaße der Fluidströmung setzen kleine Partikel, die in der Lage sind, den hochfrequenten Bewegungen der Turbulenzwirbel zu folgen, einen Teil der induzierten Turbulenzenergie in Bewegungsenergie um und reduzieren so die kinetische Turbulenzenergie der Fluidphase. Demgegenüber erhalten große Partikel ihre kinetische Energie aus der niederfrequenten mittleren Fluidströmung und sind von den turbulenten Schwankungsbewegungen des Fluids eher unbeeinflusst. Sie tragen zur Turbulenzproduktion bei, wenn sich aufgrund hoher Relativgeschwindigkeiten Wirbel in ihrem turbulenten Nachlauf bilden, wobei ein breites Spektrum von turbulenten Skalen beeinflusst wird. Die Beeinflussung des Turbulenzfeldes steigt mit zunehmender Massenbeladung der Fluid-Partikel-Strömung. Crowe stellt in [25] jedoch einen Grenzwert für die Massenbeladung

fest, ab dem sich hinsichtlich der Beeinflussung der Fluidturbulenz durch die disperse Phase eine gewisse „Sättigung“ einstellt und der Turbulenzgrad nicht weiter ansteigt. In einer ersten Erklärung dieses Phänomens führt Crowe dies auf die Überschreitung einer kritischen Volumenkonzentration zurück, ab der der turbulente Nachlauf eines Partikels bis zu dessen Abklingen nicht mehr unbeeinflusst von nachfolgenden Partikeln ist. Vielmehr tritt ab einer bestimmten Partikelkonzentration eine Interaktion der turbulenten Partikelnachläufe untereinander auf und der Turbulenzgrad der Fluidströmung steigt nicht weiter an. [48]

Um den Einfluss der Partikelbewegung auf die Fluidturbulenz hinsichtlich des gesamten turbulenten Spektrums berücksichtigen zu können, ist es im Rahmen der in Kapitel 3.1.2.2 eingeführten Transportgleichung für die turbulente Energie der Feinstruktur (Gl. (3.39)) notwendig, den Phasenwechselwirkungsterm $\bar{S}_{k^{sgs}}$ zu bestimmen. Ausgehend von der folgenden Formulierung, die den direkten Effekt der Phasenwechselwirkung berücksichtigt und den nicht-aufgelösten Anteil der fluiddynamischen Kräfte in Gl. (3.18) beinhaltet,

$$\bar{S}_{k^{sgs}} = \sum_{i=1}^3 \bar{S}_{k^{sgs},i} = \sum_{i=1}^3 \widetilde{u_i S_{u_i}} - \tilde{u}_i \tilde{S}_{u_i}, \quad (4.72)$$

wird die Feinstrukturenergie k^{sgs} indirekt durch die Partikelbewegung modifiziert, da der Phasenwechselwirkungsterm S_{u_i} das von der LES aufgelöste Strömungsfeld beeinflusst. Dies führt wiederum zu einer Änderung der Feinstrukturenergie. Der Subskript i in Gl. (4.72) steht hier für die Einstein'sche Summennotation, d.h. die Berechnung des Partikelquellterms der k^{sgs} -Gleichung setzt die Summation über alle drei Komponenten der Geschwindigkeit voraus. Die Berücksichtigung von $\bar{S}_{k^{sgs}}$ erlaubt eine direkte Modifikation der Feinstrukturenergie aufgrund der Anwesenheit der dispersen Phase und der nicht-aufgelösten turbulenten Schwankung. Im Rahmen dieser Arbeit wird Gl. (4.72) wie folgt modelliert:

$$\bar{S}_{k^{sgs},i} = \overline{u_i S_{u_i}} - \tilde{u}_i \tilde{S}_{u_i} \quad (4.73)$$

Dabei bezeichnet $\bar{\cdot}$ eine Mittelung über alle Partikel, die ein betrachtetes Kontrollvolumen durchqueren. Diese Formulierung ist ähnlich der Formulierung wie sie Chen et al. [17] im Rahmen von RANS-basierten Fluid-Partikel-Strömungen verwendet hat und beschreibt gemeinhin den dissipativen Einfluss der dispersen Phase auf die Trägergasströmung. Für die Anwendung von Gl. (4.73) muss davon ausgegangen werden, dass eine hinreichend große Anzahl von Partikeltrajektorien zur Bildung des Quellterms $\bar{S}_{k^{sgs}}$ einbezogen wird. In Abhängigkeit von den Strömungsbedingungen können in komplexen Geometrien Gebiete vorliegen, in denen diese Voraussetzung nicht erfüllt ist.

Aufgrund dessen, dass die Quelltermformulierung in Gl. (4.73) in Anbetracht der oben gemachten Anmerkungen hinsichtlich des widersprüchlichen Einflusses der Partikelbewegung auf die Fluidturbulenz keinen allgemeingültigen Modellierungsansatz zur Berücksichtigung der Phasenwechselwirkung darstellt, wird nun im Folgenden ein neuer Modellierungsansatz von Sadiki & Ahmadi [157] vorgestellt. Eine vollständige Herleitung dieses Modellsansatzes ist hierbei in [157] zu finden. Basierend auf der Auswertung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik

in Form der Entropie-Ungleichung erhalten Sadiki & Ahmadi in einer Euler'schen Betrachtungsweise einen ersten Ansatz für eine zusätzliche Quelle der turbulenten kinetischen Energie:

$$\rho \bar{S}_{k,i} = \sum_{\gamma=1}^N S_{d,\gamma} D_{0,\gamma} (\bar{u}_{d,i,\gamma} - \bar{u}_i) (\bar{u}_{d,i,\gamma} - \bar{u}_i) + 2 \sum_{\gamma=1}^N D_{0,\gamma} (k_{d,\gamma} - k) \quad (4.74)$$

Hierbei ist γ eine Partikelklasse innerhalb einer willkürlichen Größenverteilung des Partikeldurchmessers, $k_{d,\gamma} \cong k_d = \frac{1}{2} \overline{u'_{d,i} u'_{d,i}}$ die turbulente Schwankungsenergie der dispersen Phase mit $u'_{d,i} = u_{d,i} - \bar{u}_{d,i}$, $k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}$ die turbulente Schwankungsenergie der fluiden Phase, wobei $u'_i = u_i - \bar{u}_i$ ist. Im Rahmen der thermodynamisch konsistenten Vorgehensweise wird sowohl die Energiebilanz als auch die Bewegung des Mehrphasensystems und die Konituität als Nebenbedingungen mit einbezogen. Dabei ist zu erwähnen, dass nur der Einfluss der fluiddynamischen Widerstandskraft berücksichtigt wird, so dass $D_{0,\gamma}$ proportional zum Widerstandskoeffizienten C_W ist. Des Weiteren gilt $0 < S_{d,\gamma} < 1$. Für eine monodisperse Mehrphasenströmung ($\gamma = 1$) und unter Verwendung der Partikelrelaxationszeit τ_d (Gl. (4.20)) kann Gl. (4.74) als

$$\bar{S}_{k,i} = \frac{\alpha_d \rho_d}{\tau_d (C_W)} \left\{ \alpha' \left[|\bar{u}_{d,i} - \bar{u}_i|^2 + (\overline{u'_{d,i} u'_{d,i}} - \overline{u'_i u'_i}) \right] + (\overline{u'_{d,i} u'_i} - \overline{u'_i u'_i}) \right\} \quad (4.75)$$

geschrieben werden. Hierbei ist α' ein Modellkoeffizient, der eine Funktion von $S_{d,\gamma}$ ist [157]. Mit der Annahme $\alpha' = 1$ entsprechen die ersten beiden Terme in Gl. (4.75) der Partikelquelltermformulierung von Crowe [24]:

$$\bar{S}_{k,i} = \frac{\alpha_d \rho_d}{\tau_d (C_W)} \left\{ |\bar{u}_{d,i} - \bar{u}_i|^2 + (\overline{u'_{d,i} u'_{d,i}} - \overline{u'_i u'_i}) \right\} \quad (4.76)$$

Der erste Term in Gl. (4.75) beschreibt hierbei die Umsetzung von mechanische in turbulente kinetische Energie aufgrund der Wirbelbildung im turbulenten Nachlauf eines Partikels. Der zweite Term in Gl. (4.75) beschreibt die Umverteilung der kinetischen Energie zwischen den Phasen, während der letzte Term die Dissipation der Trägergasphasen-Turbulenz abbildet. Dieses Ergebnis zeigt, dass die in Crowe [24] vorgeschlagene Modellierung basierend auf der Energiebilanz nicht imstande ist, die Entwicklung des Energieniveaus in einer turbulenten Mehrphasenströmung physikalisch zu beschreiben. Nach Chrigui et al. [18] schreibt sich Gl. (4.75) in einer Lagrange'schen Betrachtungsweise nach einigen Umformungen zu

$$\bar{S}_{k,i} = \alpha_k (\overline{u_{d,i} S_{u_i}} - \bar{u}_i \bar{S}_{u_i}) + (\overline{u_i S_{u_i}} - \bar{u}_i \bar{S}_{u_i}), \quad (4.77)$$

wobei sich ein Modellkoeffizient α_k ergibt zu

$$\alpha_k = \alpha' + \frac{(1 - \alpha') (\overline{u_{d,i} S_{u_i}} - \bar{u}_{d,i} \bar{S}_{u_i})}{(\overline{u_{d,i} S_{u_i}} - \bar{u}_i \bar{S}_{u_i})}. \quad (4.78)$$

Auf der Grundlage dieser Betrachtungen wird nun der vorgeschlagene Modellierungsansatz von Sadiki & Ahmadi auf den LES-Kontext zur Modellierung des Partikelquellterms $\bar{S}_{k^{sgs},i}$, bzw. auf $\bar{S}_{k^{sgs},i}$ übertragen:

$$\bar{S}_{k^{sgs},i} = \alpha_k (\overline{u_{d,i} S_{u_i}} - \tilde{u}_i \bar{S}_{u_i}) + (\overline{u_i S_{u_i}} - \tilde{u}_i \bar{S}_{u_i}). \quad (4.79)$$

Hierbei bezeichnet \tilde{u}_i die aufgelöste, momentane Fluidgeschwindigkeit und \overline{S}_{u_i} den Impulsquellterm der Trägergasphase. Anhand numerischer Vergleichsrechnungen soll nun im Weiteren untersucht werden, inwieweit der Ansatz in Gl. (4.79) für eine LES-basierten Mehrphasenströmung vorhersagekräftig ist. Des Weiteren soll durch ein Vergleich von Simulation und Experiment ein erster Anhaltspunkt für den Betrag des freien Modellparameters α_k gegeben werden.

4.4 Numerisches Lösungsverfahren

Ausgehend von den Darlegungen der vorangegangenen Abschnitte erhält man mit den Gleichungen (4.17), (4.18), (4.27) und (4.28) ein System aus acht gewöhnlichen, miteinander gekoppelten Differentialgleichungen zur Beschreibung des Tropfenorts und der Geschwindigkeit sowie zur Bilanzierung der Tropfenmasse und der Tropfentemperatur. Für eine Fluid-Partikel-Strömung ist nun neben der Berechnung des Fluidströmungsfeldes die Berechnung der Bewegung einer Vielzahl von individuellen Partikeln notwendig. Dabei ist die Anzahl der numerisch berechneten Partikeltrajektorien in der Regel um ein Vielfaches geringer, als die wahre Anzahl der in der Strömung enthaltenen realen Partikel. Die korrekte Partikelbeladung und damit der für die Phasenwechselwirkungen maßgebliche Partikelmassenstrom wird durch eine der numerisch berechneten Partikeltrajektorie zugeordneten Partikelanzahl N_d realisiert (nach [48]). Dabei bestimmt sich $N_{d,l}$ für jedes individuelle Partikel l aus dem Partikelmassenstrom $\dot{m}_{d,j}$ in jedem Eintrittsvolumen j , der vorgegebenen Anzahl der innerhalb des Eintrittsvolumens zu startenden Partikel $\dot{N}_{d,j}$ pro Sekunde und der Masse eines Einzelpartikels m_d :

$$N_{d,l} = \frac{\dot{m}_{d,j}}{\dot{N}_{d,j} m_d} \quad (4.80)$$

Der Partikelmassenstrom $\dot{m}_{d,j}$ in einem Eintrittsvolumen ergibt sich aus dem gemessenen Volumenanteil $\alpha_{d,j}$ oder der Partikelmassenstromdichte $f_{d,j}$ zu

$$\dot{m}_{d,j} = \alpha_{d,j} \rho_d \bar{u}_{d,j} \Delta A_j \quad (4.81)$$

$$\dot{m}_{d,j} = f_{d,j} \Delta A_j, \quad (4.82)$$

wobei $\bar{u}_{d,j}$ die in jeweiligen Kontrollvolumen vorliegende mittlere Partikelgeschwindigkeit und ΔA_j die Querschnittsfläche des Kontrollvolumens j darstellt. Die Anzahl der pro Zeitschritt der Strömung zugegebenen Partikel ergibt sich somit zu $\dot{N}_{d,j} \Delta t$.

Die Lösung dieses gekoppelten Systems aus gewöhnlichen Differentialgleichungen in Abhängigkeit von der Zeit t ist nur auf dem Wege der numerischen Integration möglich. Die Bereitstellung der für die numerische Integration notwendigen Anfangsbedingungen für den Zeitpunkt $t = 0$ und deren Lokalisierung auf dem numerischen Gitternetz wird in Kapitel 4.4.1 behandelt. Um Inkonsistenzen mit dem Trägergasfluid hinsichtlich des zeitlichen Transportes zu vermeiden, werden die Transportgleichungen der dispersen Phase (Gl. (4.17), (4.18), (4.27) und (4.28)) gleichfalls mit dem in Abschnitt 3.2.3 beschriebenen, expliziten, dreistufigen Runge-Kutta-Zeitschrittverfahren nach Williamson [215] in der Zeit integriert. Die im Rahmen des

Euler-Lagrange-Verfahrens gewählte Zeitschrittweite Δt ergibt sich dabei nach den in Kapitel 3.2.5 beschriebenen Kriterien.

Die Integration der Transportgleichungen wird ausgeführt, bis eines der folgenden Abbruchkriterien erfüllt ist:

1. Das Partikel verlässt das Strömungsgebiet durch ein Randgebiet, an dem für die fluide Phase Einstrom- und Auströmrandbedingungen gesetzt sind.
2. Im Fall der Berechnung einer Fluid-Tropfen-Strömung mit verdampfenden Tropfen stellt die Verdampfung des Tropfens unterhalb eines Tropfendurchmessers von $D_d = 6 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ gleichfalls ein Abbruchkriterium dar.

Des Weiteren sind für die Trajektorienberechnung die folgenden Arten von Randbedingungen zu unterscheiden:

1. Periodischer Rand / Symmetrierand: Das Partikel wird auf die entsprechende Strömungsberandung kopiert und die Berechnung wird fortgesetzt.
2. Feste Wand: Das Partikel wird nach dem Gesetz des elastischen Stoßes zurück in das Strömungsgebiet reflektiert.

4.4.1 Partikellokalisierung auf dem numerischen Netz und Partikel-Verfolgung

Für die Vorgabe von Partikelstartbedingungen und die Verfolgung der Partikel entlang ihrer Trajektorie ist zunächst zu beachten, dass die Berechnung der Trägergasphase mit dem verwendeten CFD-Programm FLOWSI auf einem kartesischen als auch auf einem zylindrischen Koordinatensystem (vgl. Kapitel 3.2.1) erfolgen kann. Um die Beschreibung der dispersen Phase einfach zu halten und die sich aus der Beschreibung der dispersen Phase in Zylinderkoordinaten ergebende Problematik der Formulierung der Transportgleichungen auf der Symmetrieachse für $r \rightarrow 0$ zu umgehen, werden im Rahmen dieser Arbeit die Partikel in kartesischen Koordinaten im Raum transportiert. Um dabei den Bezug der Partikelphase zum zylindrischen Gitter und eine einheitliche Ausgabe der im Postprocessing generierten Mittelwerte mit der Trägergasphase zu gewährleisten, wird die Partikelposition in Umfangs- als auch in radialer Raumrichtung bestimmt zu

$$X_{d,2}^{\text{zyl}} = \Phi_d = \arctan \frac{X_{d,3}^{\text{kart}}}{X_{d,2}^{\text{kart}}}, \quad (4.83)$$

$$X_{d,3}^{\text{zyl}} = R_d = \sqrt{(X_{d,3}^{\text{kart}})^2 + (X_{d,2}^{\text{kart}})^2}. \quad (4.84)$$

Dabei bezeichnet Φ_d die Winkelposition des Partikels und R_d die radiale Position. Für die Geschwindigkeiten des Fluids und am Ort des Partikels folgt

$$U_{2,mom.}^{zyl} = U_{2,mom.}^{kart} \cos \Phi_d - U_{3,mom.}^{kart} \sin \Phi_d \quad (4.85)$$

$$U_{3,mom.}^{zyl} = U_{3,mom.}^{kart} \cos \Phi_d + U_{2,mom.}^{kart} \sin \Phi_d \quad (4.86)$$

Des Weiteren werden die Geschwindigkeiten der dispersen Phase für die Formulierung der Partikel/Tropfenquellterme in Kapitel 4.3.2.1 und 4.3.2.2 umgerechnet. Die tangentielle, bzw. die radiale Partikelgeschwindigkeit ergibt sich zu:

$$u_{d,2}^{zyl} = u_{d,3}^{kart} \cos \Phi_d - u_{d,2}^{kart} \sin \Phi_d \quad (4.87)$$

$$u_{d,3}^{zyl} = u_{d,2}^{kart} \cos \Phi_d + u_{d,3}^{kart} \sin \Phi_d \quad (4.88)$$

Ausgangspunkt für das Lagrange'sche Berechnungsverfahren ist die Vorgabe von Partikelstartbedingungen für eine stochastisch hinreichend große Anzahl zu berechnender Partikeltrajektorien [48]. Der Ort dieser Partikelstartbedingungen steht in aller Regel in keiner Beziehung zu den Randbedingungen für die Fluidströmung, sondern kann sich vielmehr auch an einem davon entfernten Punkt innerhalb der Strömungsgeometrie befinden. Falls für die Berechnung der dispersen Phase die Startposition der Partikel nicht durch eine experimentell beschriebene Düsenkonfiguration vorgegeben ist, wird diese allgemein zufällig bestimmt zu

$$X_{d,1,in} = 0,25 \Delta x, \quad X_{d,2,in} = H_y RN, \quad X_{d,3,in} = H_z RN, \quad (4.89)$$

wobei RN eine gleichverteilte Zufallszahl im Bereich $[0,1]$ und H_y sowie H_z die Abmessungen des Rechengebiets in die homogene und normale, beziehungsweise radiale Raumrichtung darstellen.

Die mittlere Partikelgeschwindigkeit am Einlass $u_{d,i}$ und die jeweilige Geschwindigkeitsfluktuation ergeben sich aus experimentellen Daten. Falls für die Geschwindigkeitsfluktuation keine Messdaten zur Verfügung stehen, wird diese zufällig aus einer Gauß'schen Verteilungsfunktion mit den entsprechenden Standardabweichungen σ_i bestimmt, so dass sich die vorgegebene Partikelgeschwindigkeit ergibt zu:

$$u_{d,i,in} = u_{d,i} + \sigma_i RG \quad (4.90)$$

Hierbei stellt RG eine Gaußverteilte Zufallszahl mit dem Mittelwert 0 und der Standardabweichung 1 dar. Für die Simulation von Fluid-Tropfen-Strömungen werden weiterhin die Tropfentemperatur am Einlass $T_{d,in}$ sowie der individuelle Tropfendurchmesser $D_{d,in}$ benötigt. Diese werden aus experimentellen Daten vorgegeben.

Durch die Vorgabe der Koordinaten der Partikelstartbedingungen ($X_{d,1,in}$, $X_{d,2,in}$ und $X_{d,3,in}$) stellt sich die Aufgabe, diese Partikelpositionen erstmalig auf dem numerischen Gitternetz zu lokalisieren und eindeutig einem bestimmten Kontrollvolumen $V_{i,j,k}$ zuzuordnen. Für das in

FLOWSI gegebene kartesische und zylindrische Gitternetz und der Beachtung der in Kapitel 3.2.1 beschriebenen versetzten Anordnung der Gittervolumina (*staggered grid*) ergibt sich diese Zuordnung durch den Vergleich der Koordinaten der Partikelposition ($X_{d,1}$, $X_{d,2}$ und $X_{d,3}$) mit den Vertexkoordinaten des jeweiligen Kontrollvolumens $V_{i,j,k}$. Die Zuordnung, die beispielsweise für die Berechnung der skalaren Partikelquellterme gemäß Kapitel 4.3.2.1 verwendet werden muss, ergibt sich zu

$$x_{i+1+\frac{1}{2}} < X_{d,1} \leq x_{i+2+\frac{1}{2}} \quad (4.91)$$

$$y_{j+1+\frac{1}{2}} < X_{d,2} \leq y_{j+2+\frac{1}{2}} \quad (4.92)$$

$$z_{k+1+\frac{1}{2}} < X_{d,3} \leq z_{k+2+\frac{1}{2}} \quad (4.93)$$

Der Index läuft von $i = 1, \dots, N - 1$, $j = 1, \dots, N - 1$, bzw. $k = 1, \dots, N - 1$. N bezeichnet hier die Anzahl der Kontrollvolumina in die jeweilige Raumrichtung. Der Index $\frac{1}{2}$ beschreibt den Zellversatz um die Hälfte der Zellweite in die jeweilige Raumrichtung. Gleichfalls gilt für das zylindrische Koordinatensystem:

$$x_{i+1+\frac{1}{2}} < X_{d,1} \leq x_{i+2+\frac{1}{2}} \quad (4.94)$$

$$\varphi_{j+1+\frac{1}{2}} < \Phi_d \leq \varphi_{j+2+\frac{1}{2}} \quad (4.95)$$

$$r_{k+1+\frac{1}{2}} < R_d \leq r_{k+2+\frac{1}{2}} \quad (4.96)$$

Die Zuordnung, die für die Berechnung der vektoriellen Partikelquellterme gemäß Kapitel 4.3.2.1 verwendet werden muss, ergibt sich zu

$$x_{i+1} < X_{d,1} \leq x_{i+2} \quad (4.97)$$

$$y_{j+1} < X_{d,2} \leq y_{j+2} \quad (4.98)$$

$$z_{k+1} < X_{d,3} \leq z_{k+2} \quad (4.99)$$

bzw.

$$x_{i+1} < X_{d,1} \leq x_{i+2} \quad (4.100)$$

$$\varphi_{j+1} < \Phi_d \leq \varphi_{j+2} \quad (4.101)$$

$$r_{k+1} < R_d \leq r_{k+2} \quad (4.102)$$

Im Hinblick darauf, dass in FLOWSI für die übrigen Koordinatenrichtungen äquidistante Zellabstände verwendet werden, ist es in normaler, bzw. in radialer Raumrichtung prinzipiell möglich die Verteilung der Zellvolumina explizit vorzugeben (äquidistant, oder gemäß einer geometrischen Reihenverteilung). Um hierbei unabhängig von der Verteilung der Zellanordnung zu bleiben, wurde im Rahmen dieser Arbeit für die disperse Phase ein Suchalgorithmus für die Zuordnung der normalen, bzw. radialen Position zu den Vertexkoordinaten des jeweiligen Kontrollvolumens implementiert. Im Rahmen dessen wird die radiale, bzw. normale Position des Partikels in das Verhältnis der physikalischen Koordinaten der numerischen Gitterzelle gesetzt und bei Unterschreitung des Wertes Eins abgebrochen und der entsprechende Index dem Partikel zugeordnet.

4.4.2 Interpolation der Fluid- und Partikelfeldgrößen am Partikelort

Die Lösung der Partikel/Tropfentransportgleichungen (4.17), (4.18), (4.27) und (4.28) erfordert die Berechnung der Fluidgeschwindigkeitskomponenten, der Fluidtemperatur, des Massenanteils des verdampfenden Stoffes sowie der Dichte und der dynamischen Viskosität am Partikelort. Zudem sind die zur Beschreibung der Partikeldispersion benötigten Feinstrukturgeschwindigkeiten am Partikelort zu interpolieren. Diese Interpolationen werden für jeden Runge-Kutta-Zeitschritt ausgeführt und stellen somit einen signifikanten Anteil des Berechnungsaufwands dar. Im einfachsten Fall und bei hinreichend engmaschigen, numerischen Gittern kann für diese Werte der jeweilige Wert der Variablen im Zellmittelpunkt des Kontrollvolumens verwendet werden, in dem sich das Partikel momentan befindet. Um den Berechnungsaufwand innerhalb einer LES-basierten Mehrphasensimulation in Grenzen zu halten, wurden im Rahmen dieser Arbeit die benötigten Fluid- und Partikelfeldgrößen am Partikelort aus einer Mittelung der Variablenwerte aus den acht Eckpunkten des Kontrollvolumens bestimmt. Der Wert einer allgemeinen Zustandsgröße ψ am Partikelort ergibt sich demnach aus (siehe Abb. 4.4):

$$\begin{aligned}
 \psi(x, y, z) = & (1 - L_i)(1 - L_j)(1 - L_k) \psi(i, j, k) + \\
 & L_i(1 - L_j)(1 - L_k) \psi(i + 1, j, k) + \\
 & (1 - L_i)(1 - L_j)L_k \psi(i, j, k + 1) + \\
 & L_i(1 - L_j)L_k \psi(i + 1, j, k + 1) + \\
 & (1 - L_i)L_j(1 - L_k) \psi(i, j + 1, k) + \\
 & L_i L_j(1 - L_k) \psi(i + 1, j + 1, k) + \\
 & (1 - L_i)L_j L_k \psi(i, j + 1, k + 1) + \\
 & L_i L_j L_k \psi(i + 1, j + 1, k + 1)
 \end{aligned} \tag{4.103}$$

Die Basisfunktionen L zur Berechnung des Funktionswertes von ψ am Partikelort ergeben sich aus der Konstruktion von Differenzenquotienten durch die angrenzenden Gitterpunkte, an denen der Wert von ψ gegeben ist:

$$L_i(x) = \frac{(X_{d,i} - x_i)}{(x_{i+1} - x_i)} \tag{4.104}$$

Die Definition von $L_j(y)$ und $L_k(z)$ erfolgt in analoger Weise. Die Polynome der tri-linearen Interpolation sind somit in jeder der drei Raumrichtungen von nullter Ordnung und der Interpolationsfehler ist von erster Ordnung. Um den beträchtlichen Berechnungsaufwand etwa mit einem höherwertigen Interpolationsschema zu vermeiden, wurde der Interpolationsfehler in Kauf genommen. Für Partikelpositionen in den Randzellen, in denen das beschriebene Verfahren nicht anwendbar ist, werden die Basisfunktionen $L_i(x)$, $L_j(y)$ und $L_k(z)$ bei Unterschreitung des Wertes von $L = 0,5$ konstant zu diesem Wert gesetzt. Bezug nehmend auf die in Kapitel 4.3.2.1

eingeführten Gewichtungsfaktoren w_d schreibt sich Gl. (4.103) somit

$$\begin{aligned}
 \psi(x, y, z) = & w_{d,i,j,k} \psi(i, j, k) + \\
 & w_{d,i+1,j,k} \psi(i+1, j, k) + \\
 & w_{d,i,j,k+1} \psi(i, j, k+1) + \\
 & w_{d,i+1,j,k+1} \psi(i+1, j, k+1) + \\
 & w_{d,i,j+1,k} \psi(i, j+1, k) + \\
 & w_{d,i+1,j+1,k} \psi(i+1, j+1, k) + \\
 & w_{d,i,j+1,k+1} \psi(i, j+1, k+1) + \\
 & w_{d,i+1,j+1,k+1} \psi(i+1, j+1, k+1).
 \end{aligned} \tag{4.105}$$

Die Gewichtungsfaktoren w_d basieren somit auf der Distanz des Partikels in der jeweiligen Koordinatenrichtung zu den acht benachbarten Knotenpunkten $(i+1, j+1, k+1)$, $(i, j+1, k+1)$, $(i, j, k+1)$, $(i+1, j, k+1)$, $(i+1, j+1, k)$, $(i, j+1, k)$, (i, j, k) , $(i+1, j, k)$ des numerischen Gitters.

5 Simulation einer vertikalen, homogenen, isotropen Gitterturbulenz

Zentrales Thema dieser Arbeit ist die Untersuchung und Validierung eines Feinstrukturmodells, in dem die Effekte der dispersen Phase in Bezug auf die Induzierung der Trägergasphasen-Turbulenz in einer thermodynamisch konsistenten Weise berücksichtigt werden. Zunächst jedoch wird anhand einer gut vermessenen Fallstudie die Strömung ohne die Partikelphase simuliert, und die beiden Ansätze zur Modellierung der turbulenten Viskosität ν_t (Smagorinsky [173] und Yoshizawa [221]) verglichen. Anschließend wird innerhalb der Anwendung des Eingleichungs-Feinstrukturmodells die disperse Phase mit in Betracht gezogen und werden insbesondere die in Kapitel 4.3.2.2 vorgestellten Ansätze der Partikelquellterm-Formulierungen zur Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase anhand der turbulenten kinetischen Energie und anhand von Energiespektren verglichen und diskutiert.

5.1 Beschreibung der Konfiguration

Geiss [53] hat im Rahmen seiner Dissertation die Modulation der Turbulenz einer mit Glas-Partikel beladenen turbulenten Strömung untersucht. Um den Grad der Komplexität in einer Zweiphasenströmung nicht weiter zu erhöhen und voneinander abhängige Interaktionen zu vermeiden, wählte Geiss eine geometrisch einfache Strömungsform. Im Rahmen seiner Arbeit wurde ein Windkanal aufgebaut und ein Gitter (Turbulenzgenerator) integriert (siehe Abb. 5.1). Hinter diesem Gitter bildet sich eine räumlich abklingende, homogen und isotrop verteilte, turbulente Strömung aus. Mittels der Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) hat Geiss die mittleren Geschwindigkeitskomponenten sowie die Momente zweiter Ordnung der fluiden als auch der dispersen Phase aufgenommen. Zusätzlich hat er mit Phasen-Doppler-Anemometrie (PDA) die Partikelgröße und Konzentration der dispersen Phase vermessen. Durch die Variation von Partikeldurchmesser und Beladungsdichte konnte Geiss insbesondere zeigen, dass Partikel mit einem vergleichsweise großen Durchmesser den Turbulenzgrad in der Strömung erhöhen, während Partikel mit einem relativ kleinen Durchmesser die Turbulenz vermindern [54]. Wie Groh et al. [64] zeigten, führt die alleinige Berücksichtigung der Partikelquellterme in der Impulsgleichung (3.18) im Rahmen einer LES-Simulation einer Zweiphasenströmung zu einer erhöhten Vorhersage der Dissipation der turbulenten kinetischen Energie $\langle k \rangle$. Aufgrund des dissipativen Charakters der Partikelquellterme in Gl. (4.70) wirkt die disperse Phase somit allein als lokale Senke im Strömungsfeld. Um zu einer in der Realität beobachteten Beschreibung der Turbulenzmodulation zu gelangen, wird in der vorliegenden Arbeit eine neue mathematische Modellie-

rung vorgeschlagen. Dabei kann die im Allgemeinen bisher vernachlässigte Turbulenzerhöhung im Rahmen des LES-basierten Euler-Lagrange-Verfahrens durch eine modifizierte Quelltermformulierung innerhalb einer verwendeten Transportgleichung für die Feinstrukturenergie k^{sgs} (Gl. (3.39)) vorgenommen werden. Die dabei untersuchten Strömungskonfigurationen mit unterschiedlichen Partikeldurchmesser und Volumenanteilen der dispersen Phase sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

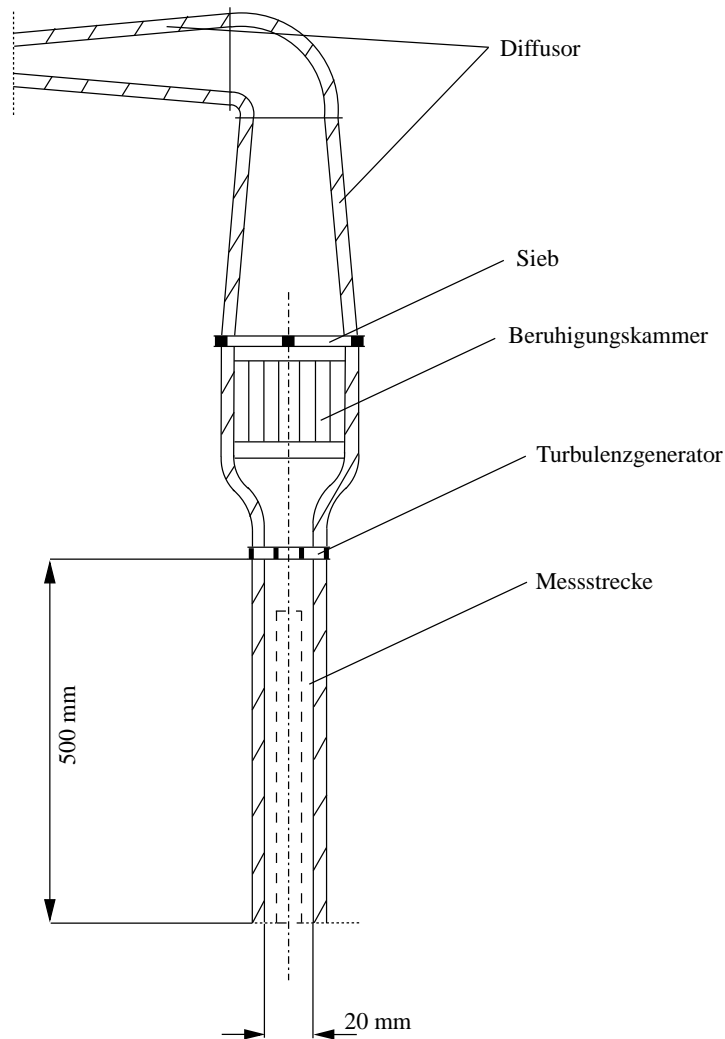


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Versuchsanlage von Geiss [53]

Tabelle 5.1: Partikeleigenschaften der untersuchten Strömungskonfigurationen

Bez.	D_d [m]	ρ_d [m ³ /kg]	α_d [-]
A	-	-	0.0
B	$120 \cdot 10^{-6}$	2440	$8,5 \cdot 10^{-5}$
C	$480 \cdot 10^{-6}$	2440	$4,1 \cdot 10^{-4}$

5.2 Numerische Abbildung

Die Resultate der numerischen Kanalsimulation werden mit Werten verglichen, die Geiss [53] experimentell an einer Kanalströmung der Reynolds-Zahl

$$Re_{cl} = \frac{H_z U_{cl}}{\nu} = 64000, \quad (5.1)$$

gebildet mit der halben Kanalhöhe $H_z = 0,1$ m und der Mittengeschwindigkeit U_{cl} , bestimmt haben. Die Mittengeschwindigkeit geben Geiss et al. mit $U_{cl} = 10$ m/s an. Für die kinematische Viskosität ν ergibt sich ein Wert von $\nu = 1,5625 \cdot 10^{-5}$ m²/s. Ferner ist im Folgenden zur dimensionslosen Auftragung der Resultate die Maschenweite M des Turbulenzgenerators von Bedeutung. Die numerischen Simulationen wurden hierbei mit Messungen verglichen, für die Geiss einen Wert von $M = 0,012$ m angibt. Für die Simulationen wurde der in Abbildung 5.1 gestrichelt dargestellte Bereich der Ausdehnung $H_x/M \times H_y/M \times H_z/M = 41,6 \times 8,3 \times 8,3$ mit $257 \times 32 \times 32 = 263168$ Zellen diskretisiert, wobei die Länge des Rechengebiets in axialer Richtung zu $H_x = 0,5$ m gewählt und in Spannweitenrichtung zu $H_y = H_z$ gesetzt wurde.

5.2.1 Rand- und Anfangsbedingungen

Effekte, die sich aufgrund einer ausgebildeten Wandgrenzschicht ergeben und die mittlere Strömung beeinflussen, werden im Rahmen der numerischen Simulation nicht weiter berücksichtigt, da sich der Fokus der Untersuchungen auf die Wechselwirkung zwischen disperser und fluider Phase in freier Strömung bezieht. Aus diesem Grund wird nur ein Ausschnitt des Kanals von der halben Kanalhöhe simuliert, so dass der wandnahe Bereich nicht betrachtet wird (Abb. 5.1). Diese Vorgehensweise verbessert bei gleichbleibender Anzahl von Gitterpunkten zudem die Auflösung der Simulation, da sich das Rechengebiet verkleinert (siehe hierzu Kapitel 5.2.2). Die für die Simulationen verwendeten Randbedingungen sind in Tabelle 5.2 zusammengefasst.

Einstromrand - Einstromgenerierung

Die Einströmung durch den Einstromrand in das Rechengebiet treibt die Strömung an. Das numerische Abbild ist eine Dirichlet-Bedingung für den Impuls sowie eine homogene von Neumann-Bedingung für den Druck. Die Einströmung durch den Einstromrand ist instationär und es müssen daher zeitlich und räumlich variierende Randwerte gesetzt werden. Weil die Momentanwerte des Experiments nicht bekannt sind, besteht beim Vergleich mit Messdaten immer die

Tabelle 5.2: Verwendete Randbedingungen für den Kanal

Kanal			
Richtung/Ort	Koordinate	Größe	Randbedingung
axial	x	$\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \tilde{u}_3$ $\tilde{P}, \nu_{\text{eff.}}$	Einstromgenerierung Gradient = 0
Spannweite	y	alle	periodisch
oben/unten wandnormal	z	\tilde{u}_1, \tilde{u}_2 \tilde{u}_3 $\tilde{P}, \nu_{\text{eff.}}$	Gradient = 0 Haftbedingung ($\tilde{u}_3 = 0$) Gradient = 0

Unsicherheit, ob das gleiche Objekt zugrunde gelegt wurde. Eine genaue Simulation lässt sich nur erreichen, wenn die Einstrombedingungen des Experiments qualitativ gut wiedergegeben werden. Dabei muss zwischen Qualität der Annäherung an den realen Versuch und Aufwand bei der numerischen Generierung abgewogen werden.

Prinzipiell ist es möglich, den Turbulenzgenerator durch zu Nullsetzen der in einem Abstand gemäß des Turbulenzgitters vorzugebenden Geschwindigkeitskomponenten abzubilden. Jedoch ist hierfür eine entsprechend feine Gitterauflösung notwendig. Ohne größeren Aufwand zu realisieren ist die randome Anregung, bei der das mittlere Eintrittsprofil mit einer zufälligen Störung bei vorgegebener Varianz überlagert wird. Bei dieser Vorgehensweise verschwinden alle räumlichen und zeitlichen Korrelationen. Das integrale Längen- und Zeitmaß der Anregung sind die Gitter- und die Zeitschrittweite. Die charakteristischen Eigenschaften dieser Randbedingung hängen daher von der Diskretisierung ab. Die Qualität dieser Methode ist aufgrund der unphysikalischen Daten sehr begrenzt [79]. Die Fluktuationen werden am Einstromrand sofort auf Null gedämpft, so dass quasi eine laminare Zuströmung besteht. Aus diesem Grunde wird im Rahmen dieser Arbeit für die Kanalsimulationen die Methode der sogenannten Einstromgenerierung verwendet (nach [79]). Der Ansatz dieser Methode besteht darin, gewisse statistische Eigenschaften der generierten Geschwindigkeitsfluktuationen beispielsweise an experimentellen Daten wie beispielsweise Geschwindigkeitsmittelwerte, Fluktuationen und Kreuzkorrelationen der Geschwindigkeit, Längen- und Zeitmaß oder Energiespektren zu adaptieren.

Um im Rahmen der Kanalsimulation die Mittelwerte und Fluktuationen der Geschwindigkeitskomponenten am Einstromrand vorzugeben, unterteilt sich das Verfahren in zwei Schritte:

1. Für jede Geschwindigkeitskomponente wird ein vorläufiges dreidimensionales Signal U_i mit einer vorgeschriebenen (erwünschten) Zweipunktstatistik erzeugt.
2. Um die Fluktuationen und die Kreuzkorrelationen zwischen den Geschwindigkeitskomponenten zu berücksichtigen, konditioniert man U_i derart, dass $\overline{U_i} = 0$ und $\overline{U_i U_j} = \delta_{ij}$

gilt. Die Einstromgeschwindigkeit u_i ergibt sich zu $u_i = \bar{u}_i + a_{ij}\bar{U}_j$, mit

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} \sqrt{R_{11}} & 0 & 0 \\ \frac{R_{21}}{\sqrt{R_{11}}} & \sqrt{R_{22} - a_{21}^2} & 0 \\ \frac{a_{11}}{\sqrt{R_{11}}} & \frac{(R_{32} - a_{21}a_{31})}{a_{22}} & \sqrt{R_{33} - a_{31}^2 - a_{32}^2} \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

wobei $(\bar{\cdot})$ einen Mittelungsoperator und R_{ij} den bekannten (beispielsweise aus Experimenten) Korrelationstensor bezeichnet. Die Bereitstellung des dreidimensionalen Signals U_i basiert auf einer inversen Fourier-Transformation. In Kapitel 3.3.1 wird für ein diskretes Signal u_i im physikalischen Raum über eine Fourier-Transformation eindeutig das zugehörige Signal $\hat{U}_i(n)$ im Wellenzahlenraum definiert. Die $\hat{U}_i(n)$, $n = 0, \dots, N-1$ sind dabei komplexe Zahlen und können somit geschrieben werden als $\hat{U}_i(n) = |\hat{U}_i(n)| \cdot e^{i\Phi_n}$, mit einem Phasenwinkel $\Phi_n \in [0, 2\pi]$. Die Energie des Signals ist nach Gl. (3.124) gegeben durch

$$\sum_{n=0}^{N-1} E_{u_i} u_i(n) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |\hat{U}_i(n)|^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} |u_i|^2. \quad (5.3)$$

Gl. (5.3) liefert einen direkten Zusammenhang zwischen dem Betrag der komplexen Koeffizienten $\hat{U}_i(n)$ und dem Energiespektrum. Ist das Spektrum $E(n)$ gegeben und wählt man Φ_n random, so erhält man durch diese Vorgehensweise ein Geschwindigkeitssignal u_i mit den Eigenschaften des vorgegebenen Spektrums.

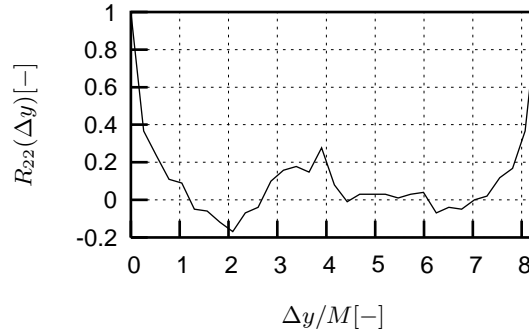
Für die Kanalsimulationen wird ein Modellspektrum verwendet, welches repräsentativ für isotrope Turbulenz ist:

$$E(\vec{\kappa}) \sim \kappa^4 \exp(-2(\kappa/\kappa_0)) \quad \text{mit:} \quad \kappa = \sqrt{\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_3^2} \quad (5.4)$$

$\vec{\kappa}$ ist hierbei der Wellenzahlvektor und κ_0 die Wellenzahl maximaler Energie, welche sich je nach vorliegender Konfiguration (siehe Tab. 5.1) bestimmt. Durch die Wahl von κ_0 wird somit der Exponent n_k , mit dem die turbulente kinetische Energie nach $\langle k \rangle^{-n_k}$ abfällt, bestimmt. Für die vorliegenden Konfigurationen bestimmt sich $1, 1 \leq n_k \leq 1, 2$. Der Korrelationstensor R_{ij} wurde entsprechend den gemessenen Werten von Geiss vorgegeben ($\approx 4, 5 - 5\%$ der ausgebildeten Kanalturbulenz).

Ausstromrand

Auf dem Ausstromrand wird die Strömung von Vorgängen im Inneren des Rechengebietes dominiert. Es bieten sich daher homogene von Neumann-Bedingungen für alle Größen an. Mit dieser Randbedingung kann jedoch der Transport von Wirbeln über den Rand des Rechengebietes nicht fehlerfrei wiedergegeben werden. In Randnähe wird die numerische Lösung deshalb gestört. Des Weiteren kann die axiale Impulskomponente durch turbulente Schwankungen vorübergehend negativ werden. Die homogene von Neumann-Bedingung entspricht in diesem

Abbildung 5.2: Autokorrelationsfunktion in homogener Richtung bei $x/M = 35$

Fall einer Diskretisierung der randnormalen Impulskomponente mit dem instabilen *downwind*-Verfahren. Zur Erhaltung der Stabilität müssen aus diesem Grunde negative Werte von $\bar{\rho}\tilde{u}_1$ auf dem Rand zu Null gesetzt werden:

$$\bar{\rho}\tilde{u}_{1,\text{imax}} = \max \{ \bar{\rho}\tilde{u}_{1,\text{imax}-1}, 0 \} \quad (5.5)$$

Als Startprofil einer jeden Rechnung wird das mittlere Einströmprofil „durchgeschoben“, d. h. die nicht-viskose Lösung vorgegeben.

5.2.2 Kriterien zur Bestimmung der Berechnungskonfiguration

Die Anwendung periodischer Randbedingungen setzt eine entsprechend große Ausdehnung des Rechengebietes voraus. Abbildung 5.2 zeigt, dass die Autokorrelationsfunktion $R_{22}(\Delta y)$ für die verwendete Punkteanzahl von 32 in Spannweitenrichtung bei etwa $\Delta y/M = 1, 2$ abgeklungen ist und damit nicht von einer gegenseitigen Beeinflussung beider Ränder auszugehen ist. Die Modelle der LES unterliegen der Annahme, dass die Feinstruktur lokal isotrop ist. Lokale Isotropie stellt sich bei hoher, turbulenter Reynoldszahl ein, was bedeutet, dass das Integrallängenmaß L um mehrere Größenordnungen größer ist als das Kolmogorov'sche Längenmaß η_k . Das zugehörige Energiespektrum ist charakterisiert durch die Ausbildung des Trägheitsbereichs, in dem das Spektrum proportional $\kappa^{-5/3}$ abfällt. Die obere und untere Grenze des Trägheitsbereichs werden gebildet durch die Wellenzahl der großen Skalen $\kappa_L = 1/L$, bzw. derjenigen des Kolmogorov'schen Längenmaßes $\kappa_\eta = 1/\eta_k$. Im großskaligen Bereich ist die Dissipation vernachlässigbar. Im Trägheitsbereich hingegen entspricht sie gerade dem Energiefluss durch die dort vorhandenen Skalen. Daher sollte die Filterweite der Bedingung

$$\frac{1}{L} \ll \frac{1}{\Delta} \ll \frac{1}{\eta_k} \quad (5.6)$$

genügen und somit im Trägheitsbereich liegen. Zusätzlich sollten die im Rahmen dieser Arbeit gewählten Filterweiten gegenüber den Partikeldurchmessergrößen der Bedingung

$$\frac{1}{\overline{\Delta}} \ll \frac{1}{D_d} \quad (5.7)$$

genügen. Die folgende Betrachtung soll die Erfüllung dieser Kriterien aufzeigen. Abbildung 5.3 zeigt das eindimensionale Energiespektrum $E_{u_2 u_2}(\kappa_y)$ für die verwendete Auflösung in der homogenen Richtung. Die Rechenläufe auf dem Gitter mit 32 Punkten zeigt den Bereich des $\kappa^{-5/3}$ -Abfalls auf. Eine einfache Abschätzung der betrachteten Konfiguration ergibt für $x/M = 35$ mit den berechneten Werten $\sqrt{\langle u_2'^2 \rangle}/U_{cl} = 0,02$, $U_{cl}/U_B = 1,0$, $L_2/M = 0,5$ die turbulente Reynoldszahl

$$Re_{t,2} = \frac{\sqrt{\langle u_2'^2 \rangle} L_2}{\nu} = 1280. \quad (5.8)$$

Aus Gl. (2.32) folgt die Kolmogorov-Länge $\eta_{k,2}/M = 1,815 \cdot 10^{-3}$. Die zugehörigen Wellenzahlen sind

$$\kappa_{L_2} = \frac{M}{L_2} = 2, \quad \kappa_{\eta_{k,2}} = \frac{M}{\eta_{k,2}} = 551 \quad (5.9)$$

und schließt die Wellenzahl der Filterweite $\kappa_{\overline{\Delta}_2} = 4$ mit $\kappa_{\overline{\Delta}_2} = M/\overline{\Delta}_2$ ein. Für den Fall des größten, untersuchten Partikeldurchmessers $D_d = 480 \cdot 10^{-6}$ m erfüllt $\kappa_{\overline{\Delta}_2}$ das Kriterium (5.7) mit $\kappa_{\overline{\Delta}_2} = 4 \ll M/D_d = 25$.

Zur Beurteilung der Auflösung in axialer Richtung stellt Abbildung 5.3 das eindimensionale Spektrum $E_{u_1 u_1}(\kappa_x)$ dar. Hier berechnet sich mit $\sqrt{\langle u_1'^2 \rangle}/U_{cl} = 0,024$, $U_{cl}/U_B = 1,0$, $L_1/M = 0,5$ die turbulente Reynoldszahl zu

$$Re_{t,1} = \frac{\sqrt{\langle u_1'^2 \rangle} L_1}{\nu} = 1536. \quad (5.10)$$

Es ergibt sich die Kolmogorovlänge $\eta_{k,1}/M = 2,04 \cdot 10^{-3}$. Die Gitterwellenzahl liegt innerhalb des Wellenzahlenbereichs

$$\kappa_{L_1} = \frac{M}{L_1} = 2 < \kappa_{\overline{\Delta}_1} = \frac{M}{\overline{\Delta}_1} = 6 < \kappa_{\eta_{k,1}} = \frac{M}{\eta_{k,1}} = 491 \quad (5.11)$$

und erfüllt Bedingung (5.6). Zusätzlich erfüllt die Filterweite in axialer Richtung die Bedingung (5.7) mit $\kappa_{\overline{\Delta}_1} = 6 \ll M/D_d = 25$.

5.3 Berechnungsergebnisse der Einphasenströmung

Inhalt des folgenden Abschnitts 5.3.2 ist der Vergleich der Ergebnisse des im Rahmen dieser Arbeit implementierten Eingleichungs-Feinstrukturmodells mit dem Ansatz von Smagorinsky [173] anhand der Einphasenkanalströmung (Fall A in Tabelle 5.1). Insbesondere soll untersucht werden, ob sich die theoretischen Vorteile der in Kapitel 3.1.2.3 vorgestellten dynamischen

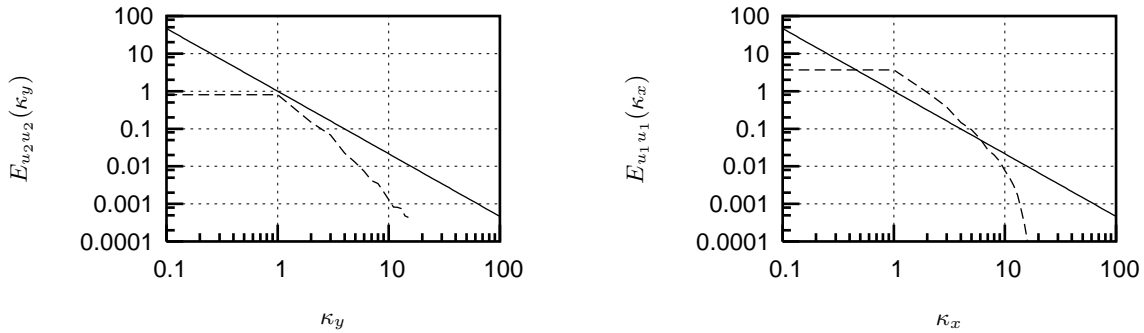


Abbildung 5.3: Energiespektrum in homogener (linkes Bild) und in axialer (rechtes Bild) Richtung bei $x/M = 35$; $\kappa^{-5/3}$: —, 32 Punkte: ---

Methoden für die Bestimmung der in der Transportgleichung für die Feinstrukturenergie auftretenden Koeffizienten in der Praxis auszahlen.

5.3.1 Geschwindigkeitsfeld der Gasphase

In den Abbildungen 5.4 - 5.5 sind zunächst die Ergebnisse der mittleren Geschwindigkeit und deren Standardabweichung in axialer und homogener Richtung dargestellt. Für beide Varianten der Feinstrukturmodellierung ergibt sich gegenüber den experimentellen Daten eine sehr gute Übereinstimmung. Die mittlere Geschwindigkeit in homogener Richtung $\langle u_2 \rangle$ weicht von den experimentellen Resultaten ab, da diese für eine homogene und isotrope Turbulenz erwartungsgemäß in der Simulation zu Null vorgegeben wurde. Für die zweiten Momente der Geschwindigkeitskomponenten ist im Vergleich zu den experimentellen Werten für den Bereich $x/M \leq 20$ eine sehr gute Übereinstimmung gegeben. Im weiteren Verlauf jedoch weichen die numerischen Resultate etwas ab. Es soll an dieser Stelle angemerkt werden, dass soweit nicht darauf hingewiesen wird, sämtliche in dieser Arbeit vorgestellten Verläufe der Turbulenzintensitäten den Anteil aus der großskaligen und der kleinskaligen Bewegung gemäß Gl. (3.118) darstellen.

5.3.2 Vergleich des Smagorinsky- und des Eingleichungs-Feinstrukturmodells

Der Vergleich des Smagorinsky-Modells mit dem Eingleichungsmodell ermöglicht die Bewertung des theoretischen Ansatzes „Produktion von Feinstrukturenergie = Dissipation von Feinstrukturenergie“, welchem ersteres zugrunde liegt.

Die Abschätzung der Feinstrukturenergie im Rahmen des Smagorinsky-Modells ergibt sich für die folgende Betrachtung aus Gl. (3.117). Desweiteren basieren alle Ergebnisse im Rahmen dieses Kapitels auf der Anwendung der Germano-Methode. Wenn im Folgenden vom Yoshizawa-Modell (insbesondere in den gezeigten Abbildungen) gesprochen wird, ist hierbei die Anwendung des Eingleichungs-Feinstrukturmodells gemeint.

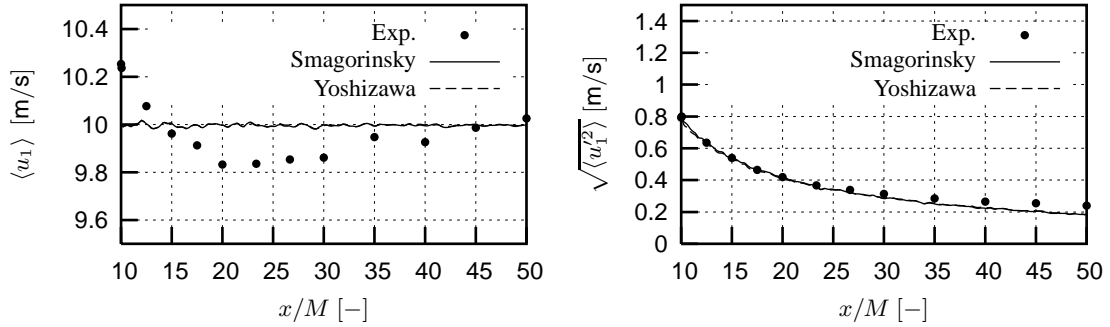


Abbildung 5.4: Mittlere Geschwindigkeit und Standardabweichung in axialer Richtung für den Fall A

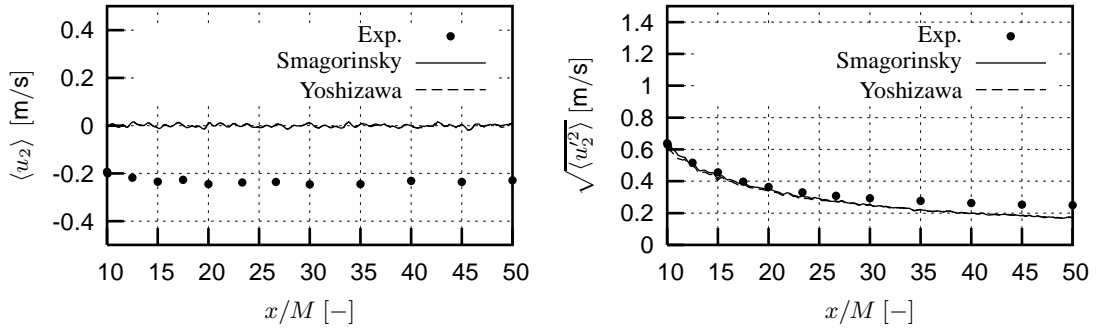


Abbildung 5.5: Mittlere Geschwindigkeit und Standardabweichung in homogener Richtung für den Fall A

In Abbildung 5.6 (linkes Bild) ist zunächst der Verlauf der turbulenten kinetischen Energie $\langle k \rangle$ der großen und der kleinen Skalen ($\langle k \rangle$ wurde hierbei im Sinne der Gl. (3.118) erhalten) für beide Feinstrukturmodelle dargestellt. Beide Modelle zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Im rechten Bild der Abbildung 5.6 ist der jeweilige Anteil der Grobstrukturenergie $\langle k^{\text{gs}} \rangle$ sowie der Feinstrukturenergie $\langle k^{\text{sgs}} \rangle$ gezeigt. Beide Feinstrukturmodelle zeigen für die großen Skalen einen fast identischen Verlauf. Demgegenüber führt die Bestimmung der Feinstrukturenergie mit dem Smagorinsky-Modell gerade auch am Einstromrand zu einem vergleichsweise erhöhten Beitrag. Der Verlauf des aufgelösten Anteils der turbulenten kinetischen Energie ist in Abbildung 5.7 (linkes Bild) dargestellt. Das Yoshizawa-Modell bestimmt die Auflösung über die ganze Kanallänge zu über 90 %. Im Vergleich hierzu weist das Smagorinsky-Modell im axialen Verlauf für $x/M > 20$ eine Auflösung von 85 % auf, während der Einstromrand nur mit 73 % aufgelöst wird. Dieser geringe Wert ergibt sich durch die Abschätzung der Feinstrukturenergie über die turbulente Viskosität, welche am Einstromrand insbesondere durch die vorgegebene Turbulenz (vgl. Kapitel 5.2.1) abhängt. Hier

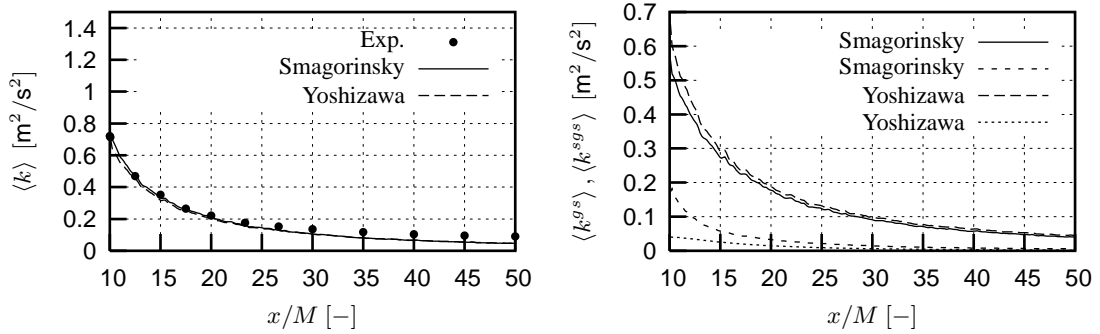


Abbildung 5.6: Fall A: Mittlere turbulente kinetische Energie (linkes Bild) und Vergleich der Fluktuationen: Kinetische Energie der großen Skalen: —, ---; Feinstrukturenergie: ----, ····

treten vergleichsweise hohe Geschwindigkeitsgradienten auf, so dass die turbulente Viskosität gegenüber dem Verlauf im Kanal am Einstromrand erhöht wird.

Das Verhältnis von modellierter Feinstrukturenergie zu der Energie der großen Skalen ist in Abbildung 5.7 (rechtes Bild) gezeigt. Für das Yoshizawa-Modell ergibt sich ein Maximalwert von 10 %. Dieser Wert ist im Rahmen einer LES als modellierter Anteil zu akzeptieren. Für das Smagorinsky-Modell ergibt sich am Einstromrand ein Wert von über 30 % und im weiteren Verlauf von über 15 %. Die im vorigen Kapitel 5.2.2 durchgeführte Abschätzung der Längenskalen weist daraufhin, dass die Einphasenkanalsimulation zwar noch Potential bezüglich der Gitterauflösung hat, jedoch ergibt die Abschätzung der Feinstrukturenergie im Rahmen der Verwendung des Smagorinsky-Modells (Lilly, Gl. (3.117)) im Einstrombereich einen vergleichsweise zu hohen Beitrag. Diese Einschätzung wird auch von Klein [80] getragen, der anhand der numerischen Untersuchung eines ebenen, turbulenten Freistrahls zu dem Ergebnis kommt, dass die Feinstrukturenergie mit dem Ansatz von Lilly als vergleichsweise zu hoch abgeschätzt wird.

Im Rahmen der Anwendung des Eingleichungs-Feinstrukturmodells ist der Dissipations- und der Produktionsterm (Gl. (3.38) und (3.61)) für den lokalen Beitrag der Feinstrukturenergie bestimmend. Die beistehenden Konstanten geben Menon et al. [118] für die Berechnung einer zeitlich abklingenden, isotropen Turbulenz zu $C_k = 0,09$, $C_\epsilon = 0,916$ und $Pr_t = 1,0$ an. Der Vergleich dieser Werte für eine räumlich abklingenden Gitterturbulenz mit den dynamisch bestimmten Koeffizienten zeigt für den Germano-Koeffizienten $\langle C_{\text{Germ}} \rangle$ in Abbildung 5.8 (linkes Bild) entlang der axialen Achse einen etwas erhöhten Betrag von bis zu 0,2 am Einstromrand. Dieser Maximalwert korrespondiert mit dem höchsten Wert für die Produktions- und der Dissipationsrate (Abb. 5.8, rechtes Bild). Prinzipiell zeigen die Koeffizienten eine starke Abhängigkeit von der in Kapitel 5.2.1 beschriebenen Methode der Einstromgenerierung. Für C_ϵ ergibt sich gegenüber einem Wert von 0,916 aufgrund der Einstromrandbedingung vergleichsweise ein erhöhter Beitrag (Abb. 5.9, rechtes Bild). Die in Kapitel 3.1.2.3 beschriebene Berücksichtigung sogenannter „backscattering“-Effekte (vgl. Piomelli et al. [138]) durch das Zulassen lo-

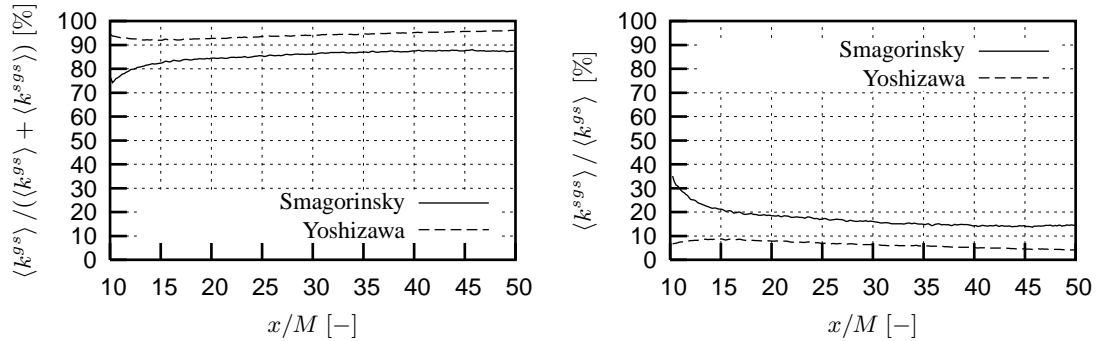


Abbildung 5.7: Fall A: Verlauf des aufgelösten Anteils der turbulenten kinetischen Energie (linkes Bild) und Verhältnis der turbulenten kinetischen Energie der kleinen Skalen zu den großen Skalen (rechtes Bild)

kal negativer Werte des Produktionskoeffizienten $\langle C^{sgs} \rangle$ in Gl. (3.63), ergibt gegenüber dem Germano-Koeffizienten $\langle C_{Germ} \rangle$ eine Verringerung bis hin zu einem negativen $\langle C_{sgs} \rangle$ ab $x/M = 21$ (Abb. 5.9, linkes Bild).

Resümee

Das Eingleichungs-Feinstrukturmodell zeigt gegenüber dem Modellierungsansatz von Smagorinsky einen vergleichsweise geringeren Beitrag der Feinstrukturenergie. Insbesondere ist die Abschätzung der Feinstrukturenergie nach Lilly für den Einstrombereich zu hoch. Durch die Vorgehensweise im Rahmen der Simulation, gewissermaßen Turbulenz am Einstromrand vorzugeben, die im weiteren Verlauf gemäss $\langle k \rangle^{-1,2}$ für die Einphasenströmung abklingt, finden sich am Einstromrand hohe Geschwindigkeitgradienten und damit hohe Werte für die turbulente Viskosität ν_t . Für das Yoshizawa-Modell gilt dies gleichfalls, jedoch ergibt sich gegenüber dem Smagorinsky-Modell der Gesamtbeitrag der turbulenten kinetischen Energie der kleinen Skalen aus den Raten für die Produktion und die Dissipation, die im Rahmen des Ansatzes einen gemeinhin gleichen Beitrag liefern (siehe Abb. 5.8). Somit ist festzuhalten, dass mit dem Eingleichungs-Feinstrukturmodell eine verlässlichere Aussage über den Anteil des Feinstrukturenergieanteils getroffen werden kann und den Mehraufwand, eine zusätzlichen Transportgleichung zu lösen, rechtfertigt.

5.4 Berechnungsergebnisse der Mehrphasenströmung

Inhalt der folgenden Abschnitte 5.4.1 - 5.4.4 ist die Darstellung der Ergebnisse auf der Basis des Eingleichungs-Feinstrukturmodells. Im Rahmen dieses Modells finden die Effekte der dispersen Phase in Form von Partikelquelltermformulierungen Berücksichtigung (vgl. Kap. 4.3.2.2). Anhand zweier Zweiphasenkanalströmungen (Fall B und C in Tabelle 5.1) soll gezeigt und diskutiert werden, inwieweit die aus der Literatur übernommene Modellierung (im Folgenden

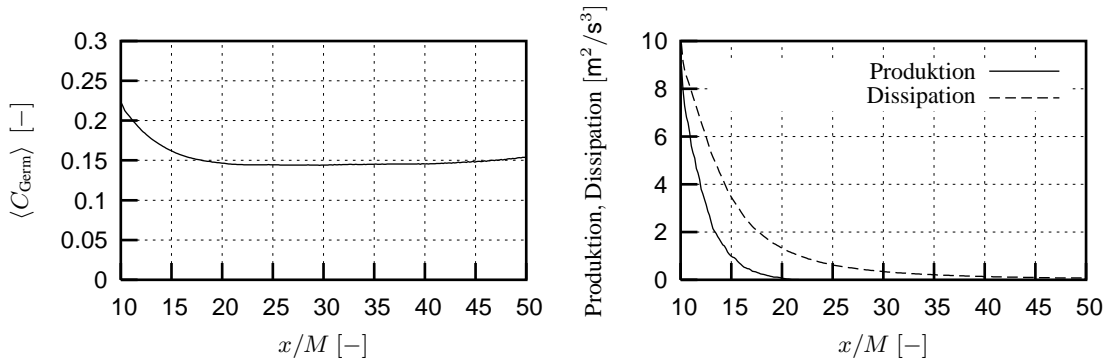


Abbildung 5.8: Fall A: Verlauf des Germano-Koeffizienten (linkes Bild) und Verlauf der Produktion und der Dissipation der turbulenten kinetischen Energie der kleinen Skalen (rechtes Bild)

Standard-Modellierung genannt) und die neu-vorgeschlagene Modellierung in der Lage sind, die auftretenden Phänomene der Turbulenzmodulation zu beschreiben. Aufgrund dessen, dass die abklingende Gitterturbulenz in der Literatur vielfach mit numerischen Methoden basierend auf RANS untersucht wurden, werden die Resultate der LES neben experimentellen Ergebnissen auch mit RANS-Simulationen von Chrigui et al. [18] verglichen. In Abschnitt 5.4.4 wird dann abschließend anhand von Leistungsdichtespektren der axialen Geschwindigkeit der Einfluss vergleichsweise kleiner und großer Partikel in einem Mehrphasensystem diskutiert.

5.4.1 Geschwindigkeitsfeld der Trägergasphase

In Abbildung 5.10 sind die mittleren axialen Geschwindigkeiten für die Fälle B (linkes Bild) und C (rechtes Bild) gezeigt. Aufgrund der Einfachheit der betrachteten Strömung ergibt sich für beide Konfigurationen eine gute Übereinstimmung gegenüber den experimentellen Daten, sowohl für die RANS-, als auch für die LES-Resultate.

5.4.2 Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase

Die Abbildungen 5.11 und 5.12 zeigen den Vergleich der LES- und der RANS-Simulationen mit den experimentellen Daten für die mittlere axiale Geschwindigkeit und deren Standardabweichung der Fälle B und C. Für beide Simulationen ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Für die RANS-Simulationen verwendeten Chrigui et al. 20000 numerische Partikel, so dass im Fall B ein numerisches Partikel 450 reale Partikel repräsentierte und im Fall C ein numerisches Partikel 40 reale Partikel abbildete. Für die LES-Simulationen wurden 300000 numerische Partikel verwendet. Dabei ergab sich im Fall B bei einem Volumenanteil von $\alpha_d = 8,5 \cdot 10^{-5}$ für jedes individuelle Partikel ein N_d von 30. Im Fall C wurden 2,7 reale Partikel von einem numerischen Partikel abgebildet. Je nach Wahl der Gesamtanzahl der numerischen Partikel im Rahmen einer

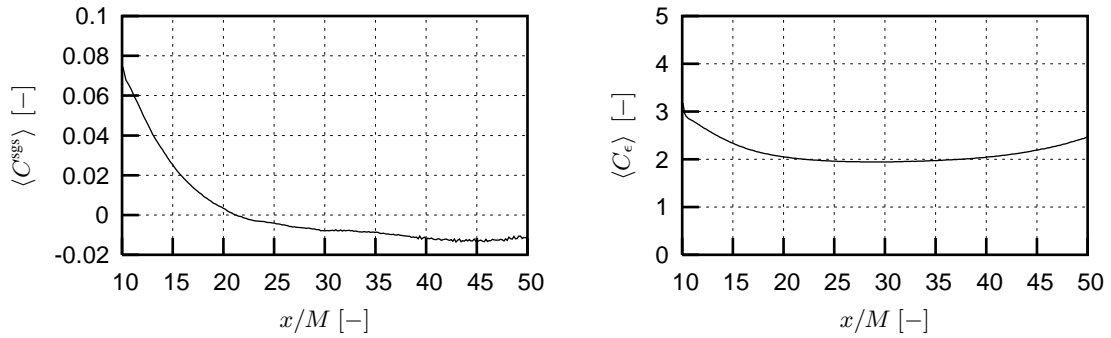


Abbildung 5.9: Fall A: Verlauf des Produktions- (linkes Bild) und des Dissipationskoeffizienten (rechtes Bild) der turbulenten kinetischen Energie der kleinen Skalen

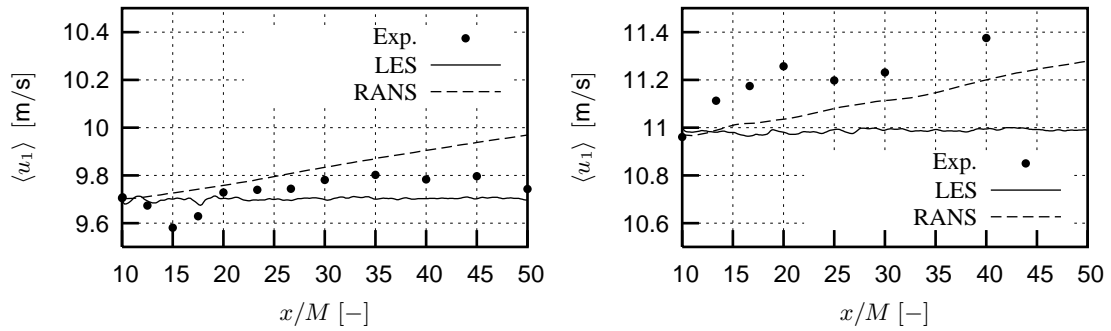


Abbildung 5.10: Mittlere axiale Geschwindigkeit der Trägergasphase für die Fälle B (linkes Bild) und C (rechtes Bild)

numerischen Simulation, kann sich prinzipiell ein hoher Wert für N_d ergeben. Um die numerische Stabilität des LES-Verfahrens zu gewährleisten, sollte dieser Faktor nicht über 100 liegen, wie auch Boivin et al. [10] und Elghobashi & Truesdell [43] bestätigen.

5.4.3 Turbulente kinetische Energie der Trägergasphase

Mit der numerischen Beschreibung des aus einer Reihe von experimentellen Untersuchungen [55], [87], [223] bekannten Phänomens der Turbulenzmodulation hat sich in Vergangenheit eine Reihe von wissenschaftlichen Gruppen beschäftigt (vgl. Kapitel 1.3.2.1). So ist allgemein bekannt, dass vereinfacht gesagt, vergleichsweise kleine Partikeldurchmessergrößen die Turbulenzintensität verringern, während relativ große Partikel durch die Ausbildung eines Nachlaufs, welcher sich je nach Größe der Partikel-Reynoldszahl Re_d (Gl. (2.9)) ausbildet, die Turbulenz anfachen. Um nun beide Phänomene der Turbulenzverringern und -verstärkung darzustellen, wurden im Rahmen dieser Arbeit zwei Konfigurationen aus den Untersuchungen von Geiss [53]

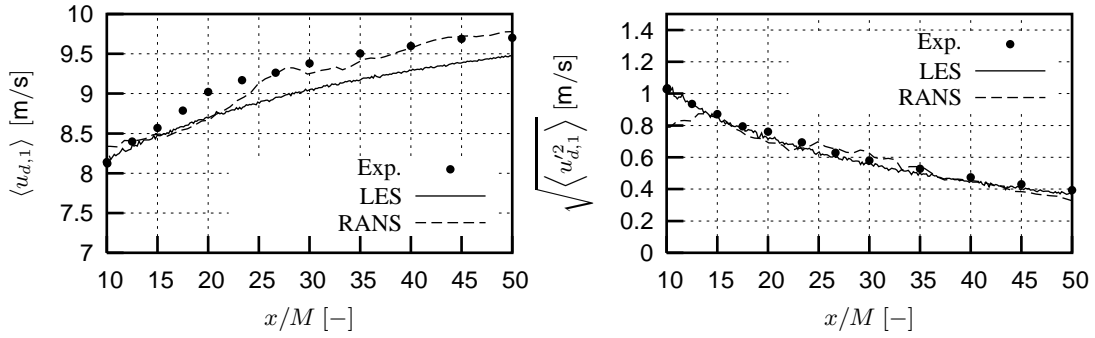


Abbildung 5.11: Mittlere axiale Geschwindigkeit und Standardabweichung der dispersen Phase für den Fall B

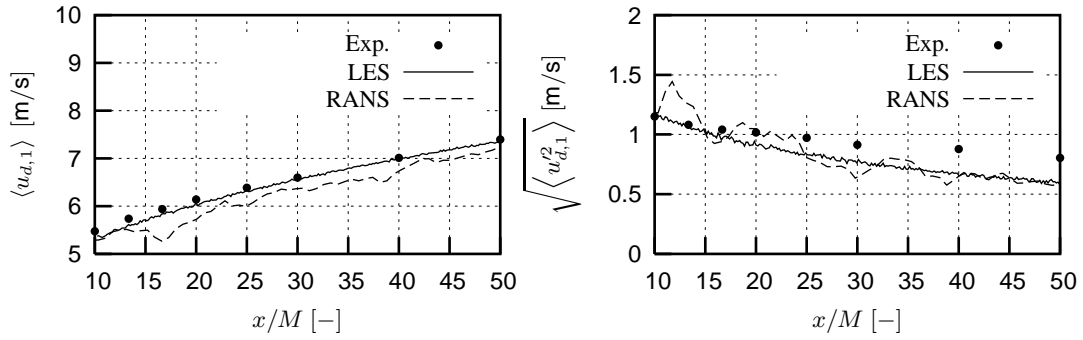


Abbildung 5.12: Mittlere axiale Geschwindigkeit und Standardabweichung der dispersen Phase für den Fall C

ausgewählt, bei denen die experimentellen Daten diese Phänomene beschreiben. In den Abbildungen 5.13 und 5.14 ist die mittlere turbulente kinetische Energie für die Fälle B und C dargestellt. Für die LES-Simulationen ist hierbei der Anteil der großen und der kleinen Skalen beschrieben (Der Feinstrukturanteil wurde hierbei wiederum im Sinne der Gl. (3.118) erhalten). Gezeigt werden Ergebnisse, die im Rahmen der Anwendung des Eingleichungs-Feinstrukturmodells unter Berücksichtigung der Quelltermformulierungen in Kapitel 4.3.2.2 erhalten wurden. Die Ergebnisse werden hierbei mit experimentellen Daten und mit RANS-Simulationen verglichen. Im Rahmen der RANS-Modellierungen wurden in analoger Weise zu dem in Kapitel 4.3.2.2 beschriebenen Vorgehen Partikelquellterme für das k - ε -Turbulenzmodell formuliert (siehe hierzu Chrigui et al. [18]).

Durch die vergleichsweise kleinen Partikeldurchmessergrößen von $D_d = 120 \cdot 10^{-6}$ m ist keine Anfachung der mittleren turbulenten kinetischen Energie $\langle k \rangle$ gegenüber einer Einphasenströmung zu erwarten. Für die Standardquelltermformulierung im Rahmen von RANS und insbesondere für die LES im Rahmen der Feinstrukturmodellierung ergibt sich für den Fall B

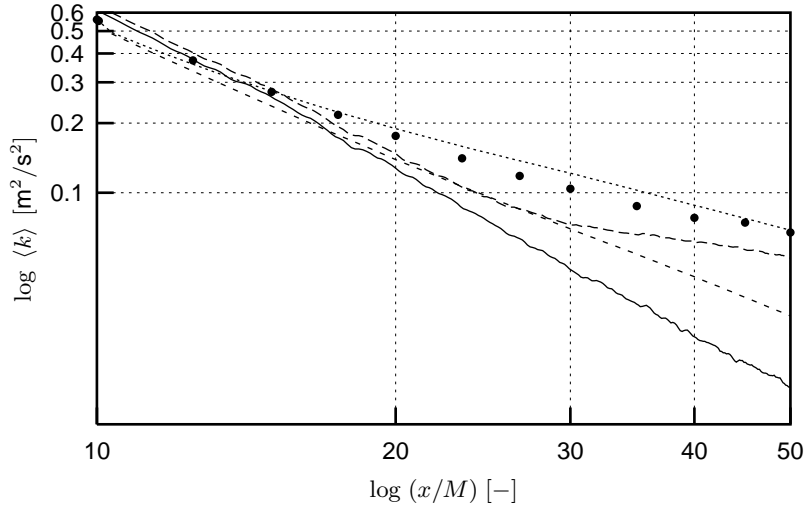


Abbildung 5.13: Mittlere turbulente kinetische Energie der Trägergasphase für den Fall B in doppeltlogarithmischer Auftragung: Exp.:•; LES: Standard: —, Sadiki & Ahmadi: ---; RANS: Standard: ----, Sadiki & Ahmadi: ·····

ab einem $x/M = 20$ in Abb. 5.13 eine vergleichsweise zu geringe Vorhersage der mittleren turbulenten kinetischen Energie $\langle k \rangle$.

Zudem ergibt sich in Abb. 5.14 für den Fall C, in Rahmen dessen aufgrund der verwendeten großen Partikel ($D_d = 480 \cdot 10^{-6}$ m) eine Verstärkung der Turbulenzintensität zu erwarten ist, gleichfalls eine numerische Vorhersage von Turbulenzabschwächung; ein Ergebnis, welches die physikalischen Effekte der Wechselwirkung zwischen den beteiligten Phasen nicht abbildet.

Für die im Rahmen der Feinstrukturmodellierung neu-vorgeschlagene Quelltermformulierung (Gl. (4.79)) von Sadiki & Ahmadi [157] wird die mittlere turbulente kinetische Energie für die LES-Simulationen in Abhängigkeit des Modellparameters α_k (Gl. (4.78)) in tendenziell besserer Übereinstimmung mit den experimentellen Daten bestimmt. Für die LES-Simulationen (Fall B und C) wurde hierbei α_k zu 0,05 vorgegeben. Dieser vergleichsweise geringe Anteil des Produktionsterms in Gl. (4.79) führt dennoch zu einem Anstieg der Feinstrukturenergie (Abb. 5.15). Während der Anteil der aufgelösten turbulenten kinetischen Energie sowohl für den Fall B als auch für den Fall C entlang des axialen Verlaufs für beide Partikelquellterm-Formulierungen fast identisch bestimmt wird, ist der numerisch bestimmte Beitrag der Feinstrukturenergie im Fall vergleichsweise kleiner Partikel leicht erhöht, wohingegen im Fall C (großer Partikel) die Strömung durch die Energie der kleinen Skalen dominiert wird (Abb. 5.15, rechtes Bild). Zu einem vergleichbaren Ergebnis kommen auch Nadaoka et al. [127], die ausgehend von einer über das Volumen einer Gitterzelle des numerischen Gitternetzes gemittelten Lagrange'schen Bewegungsgleichung ein Feinstrukturmodell für die Berechnung von Fluid-Partikel-Strömungen im

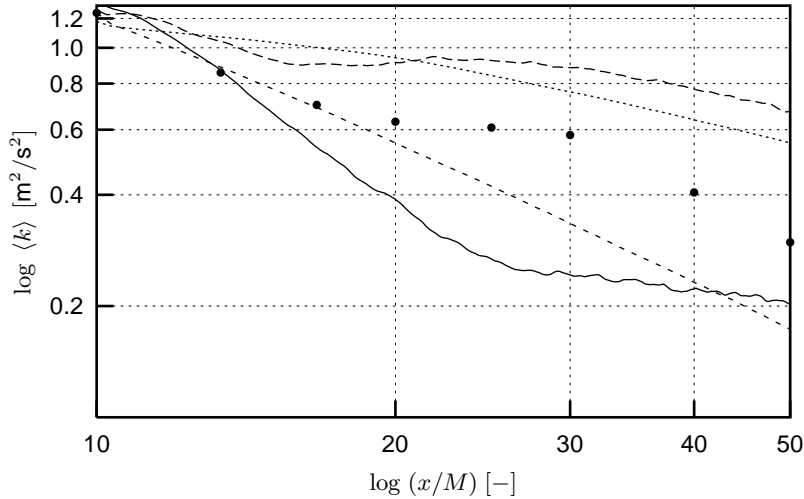


Abbildung 5.14: Mittlere turbulente kinetische Energie der Trägergasphase für den Fall C in doppeltlogarithmischer Auftragung: Exp.: •; LES: Standard: —, Sadiki & Ahmadi: ---; RANS: Standard: - · -, Sadiki & Ahmadi: ····

Rahmen einer LES abgeleitet haben. Im Vergleich eines Partikel-beladenen Freistrahls gelangen sie zu einer guten Übereinstimmung mit experimentellen Messdaten.

5.4.4 Energiespektren der Trägergasphase

Abschließend sollen nun die im vorigen Abschnitt gezeigten Ergebnisse anhand von räumlichen Energiespektren verifiziert werden. Dabei wird ausgenutzt, dass die LES aufgrund des instationären Verfahrens und der statistischen Auswertung Informationen zur Verfügung stellt, die mit RANS-Methoden nicht gewonnen werden können. Im Folgenden werden Spektren für $x/M = 20$ auf der Hauptachse für die in Tabelle 5.1 beschriebenen Fälle ausgewertet. Zugrunde liegend für diese Auswertung sind LES-Simulationen, die mit dem Eingleichungs-Feinstrukturmodell und der darin enthaltenen Partikelquelltermformulierung von Sadiki & Ahmadi erhalten wurden. Für den Fall A in Tabelle 5.1 ist $\bar{S}_{ksgs} = 0$ und $\bar{S}_{u_i} = 0$.

Abbildung 5.16 zeigt einen ausgeprägten Bereich des $\kappa^{-5/3}$ -Abfalls des Energiegehalts für den Fall A. Aus zahlreichen numerischen Untersuchungen [43] sowie experimentellen Forschungsarbeiten, an dieser Stelle sei die Arbeit von Sato [160] genannt, ergibt sich je nach Durchmessergröße der Partikel in der dispersen Phase eine Formänderung des zugrundeliegenden Spektrums einer Mehrphasenströmung gegenüber der Einphasenströmung.

Im Fall kleiner Glas-Partikel hat man gegenüber einer unbeladenen Strömung eine Verringerung des Energieniveaus für kleine Wellenzahlen festgestellt. Darüber hinaus hat man eine

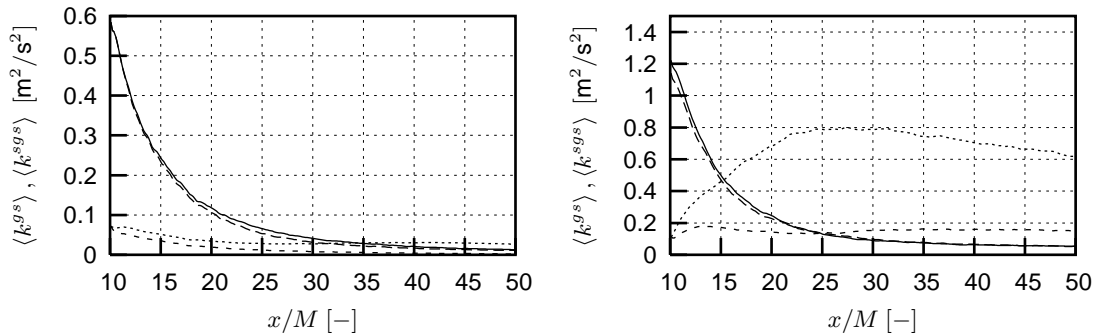


Abbildung 5.15: Vergleich der Fluktuationen der LES-Trägersgasphase für die Fälle B (linkes Bild) und C (rechtes Bild): Anteil der großen Skalen: Standard: —, Sadiki & Ahmadi: ---; Feinstrukturenergie: Standard: ----, Sadiki & Ahmadi:

relative Erhöhung für den Bereich großer Wellenzahlen gefunden. Im Fall großer Glas-Partikel konnte man eine Erhöhung des Energiegehalts im kleinen Wellenzahlenbereich gegenüber einer Einphasenströmung ermitteln. Eine detaillierte Diskussion dieser Mechanismen kann man in Sato [160] entnehmen.

Vor dem Hintergrund dieser Ergebnisse sind die in Abb. 5.16 gezeigten Spektren für die Fälle B und C dargestellt. Die numerischen Spektren sind hierbei mit der in Kap. 3.3.1 beschriebenen Methode mittels Fast-Fourier-Transformation erhalten worden, wobei die gefilterten Größen der axialen Geschwindigkeit verwendet wurden. Um eine konsistente Abbildung der Partikelquellterm-Formulierung im Bereich der nicht-aufgelösten Strukturen zu gewinnen, ist jedoch der Feinstrukturanteil der Geschwindigkeitskomponenten beispielsweise über eine Berücksichtigung der Feinstrukturenergie hinzu zuziehen.

Gegenüber der Einphasensimulation (Fall A) ergibt sich für den Fall B eine Absenkung des Turbulenzniveaus im Vergleich zum Fall A, während im Fall C eine Turbulenzanfachung in der doppel-logarithmischen Auftragung deutlich zu sehen ist. Deutlich zu sehen ist auch die ungleichmäßige Verteilung der induzierten Energie aufgrund der Anwesenheit der dispersen Phase im Fall B. Im Bereich vergleichsweise großer Wellenzahlen $\kappa_x > 6$ wird den kleinen Turbulenzelementen durch die Anwesenheit der Partikel Energie bereitgestellt, was zu einer zusätzlichen Dissipation in diesem Bereich führt. Als Ausgleich werden die kleinen Turbulenzelemente von den großen durch eine erhöhte Energiemenge versorgt, so dass ein indirekter Einfluss der Partikel auf die Energieverteilung der großen Turbulenzelemente besteht. Es resultiert dadurch eine Verringerung der Energieproduktion. Wie Groh et al. [64] gezeigt haben, transferieren die Partikel ihren Impuls in einer anisotropen Form zu den kleinen Turbulenzelementen. Die Energie aufnehmenden Komponenten können dann Ursache einer inversen Kaskade sein, die die Energie von den kleinen zu den großen Turbulenzelementen transportiert.

Im Fall C (großer Partikel) ergibt sich aufgrund der Interaktion vergleichsweise großer Wirbelstrukturen mit Fluktuationen, welche sich aufgrund der Partikelbewegung ergeben, eine Erhöhung

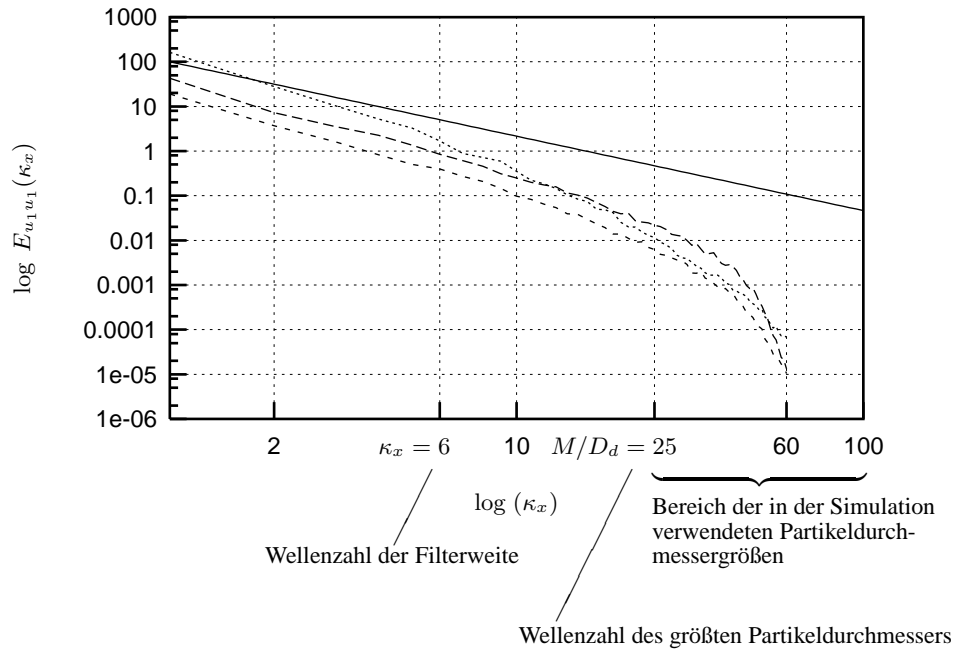


Abbildung 5.16: Energiedichtespektrum der axialen Geschwindigkeit des Trägergases: $\kappa^{-5/3}$:
—; Fall A: ---; Fall B: Sadiki & Ahmadi: -.-.-; Fall C: Sadiki & Ahmadi:

im kleinen Wellenzahlenbereich (siehe Abb. 5.16). Für den Bereich großer Wellenzahlen $\kappa_x > 6$ ergibt sich zudem eine Erhöhung aufgrund der Bildung von Wirbelstrukturen, deren Größe im Bereich des Partikeldurchmessers liegen (Nachlauf-turbulenz).

6 Simulation einer verdrahten Strömung

Inhalt dieses Kapitels ist die Untersuchung des Dispersionsverhalten von Feststoffpartikeln anhand einer Strömungskonfiguration, deren Turbulenz eine komplexe Struktur aufweist. Hierfür wird eine experimentelle Studie von Sommerfeld & Qiu [181] herangezogen. Die LES-Simulationen, welche der Messung gegenübergestellt werden, werden zum einen mit der klassischen Smagorinsky-Feinstrukturmodellierung (ohne Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase) und zum anderen mit dem Eingleichungs-Feinstrukturmodell, im Rahmen dessen die Partikelquelltermformulierung von Sadiki & Ahmadi Verwendung findet, welche im Kapitel 5 mit dem Modellparameter zu $\alpha_k = 0,05$ validiert wurde, durchgeführt. Insbesondere soll durch diesen Vergleich gezeigt werden, inwieweit es in Bereichen, in denen die überhöht vorhergesagten Feinstrukturanteile durch den Smagorinsky-Ansatz (vgl. Kapitel 5.3.2) zu einer verbesserten numerischen Vorhersage mit dem Eingleichungsmodell bei zusätzlicher Berücksichtigung der modellierten, dispersen Phase führen.

6.1 Beschreibung der Konfiguration

Abbildung 6.1 zeigt die schematische Darstellung des Versuchsaufbaus, den Sommerfeld & Qiu für ihre Messungen wählten. Durch den Primär- und quer dazu strömenden Sekundärstrom wird im radialen Drall-Generator eine verdrahte Strömung erzeugt, deren Drallzahl Sommerfeld & Qiu mit $S = 0,47$ angeben. Die Drallzahl definierten sie hierbei zu

$$S = \frac{2 \int_0^{D_3/2} \rho u_3 u_1 r^2 dr}{D_5 \int_0^{D_3/2} \rho u_1^2 r dr}. \quad (6.1)$$

Fluid- und Partikelgeschwindigkeitskomponenten, sowie der Partikeldurchmesser wurden mit Phasen-Doppler-Anemometrie (PDA) vermessen. Die Partikeldurchmessergröße rangierte in einem Spektrum von $20 \cdot 10^{-6}$ m bis zu $80 \cdot 10^{-6}$ m. Die weiteren Strömungskonditionen der Messung sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. Als Ergebnis ihrer Studie konnten Sommerfeld & Qiu zeigen, dass aufgrund der Verdrehung der Strömung das Dispersionsverhalten der dispersen Phase entscheidend beeinflusst wird. Aufgrund von turbulenter Diffusion, radialen Partikeltransport und Zentrifugalkrafteffekten wurde eine Separation der dispersen Phase beobachtet.

Tabelle 6.1: Strömungskonditionen

<i>Trägergaströmung</i>	
Primärer Massenstrom	0,0099 kg/s
Sekundärer Massenstrom	0,0383 kg/s
Reynoldszahl Re_{D_3}	52400
Drallzahl S	0,47
<i>Disperse Phase</i>	
Mittlerer Partikeldurchmesser	$45,5 \cdot 10^{-6}$ m
Partikelmassendichte	2500 kg/m ³
Partikelmassenstrom	0,00034 kg/s
Beladung	0,034

Dabei findet sich eine große Anzahl an Partikeln mit einem vergleichsweise kleineren, mittleren Durchmesser in den äußeren, wandnahen Bereichen wieder, wohingegen Partikel mit einem vergleichsweise großen, mittleren Durchmesser aufgrund ihrer Trägheit entgegen der inneren Rezirkulationszone wandern.

6.2 Numerische Abbildung

Die Resultate der numerischen Simulation werden mit Werten verglichen, die Sommerfeld & Qiu [181] experimentell an einer verdrallten Strömung der Reynolds-Zahl $Re_{D_3} = 52400$ bestimmt haben. Für die Simulationen wird der in Abbildung 6.1 gestrichelt dargestellte Bereich mit $193 \times 32 \times 52 = 319488$ Zellen diskretisiert. Die Diskretisierung ist in axialer und in homogener Richtung äquidistant, in radialer Richtung wird das Gitternetz entsprechend einer geometrischen Reihe mit Faktoren um 1,05 zwischen zwei benachbarten Zellen unterteilt. Die Ausdehnung des verwendeten Gitters beträgt (Länge \times Umfang \times Radius) $H_x \times H_y \times H_z = 0,6 \text{ m} \times 6,28 \text{ rad} \times 0,097 \text{ m}$.

Das in Abbildung 6.1 skizzierte Berechnungsgebiet stellt in axialer Richtung nur einen Ausschnitt des physikalischen Raums dar, in dem sich die Drallströmung entwickelt. Dies führt zwangsläufig zu Rändern, an denen die Vorgabe von Randbedingungen für die Euler'schen Berechnungsgrößen erforderlich ist, um die partiellen elliptischen Differentialgleichungen, die die Strömung beschreiben, lösen zu können. Bei der Formulierung von Randbedingungen wird man jedoch mangels genauer Kenntnis der Strömung immer auf Annahmen zurückgreifen müssen, wobei sich die Güte einer Randbedingung selten *a priori* abschätzen lässt. Erst der Verlauf der Rechnung wird darüber Aufschluss geben (vgl. Kapitel 5.2.1). Aufgrund dessen, dass Sommerfeld & Qiu einen nur durch einige Umbauarbeiten sich unterscheidenden Versuchsaufbau für die vorliegende und der im folgenden Kapitel 7 beschriebenen Studie gewählt haben, ist

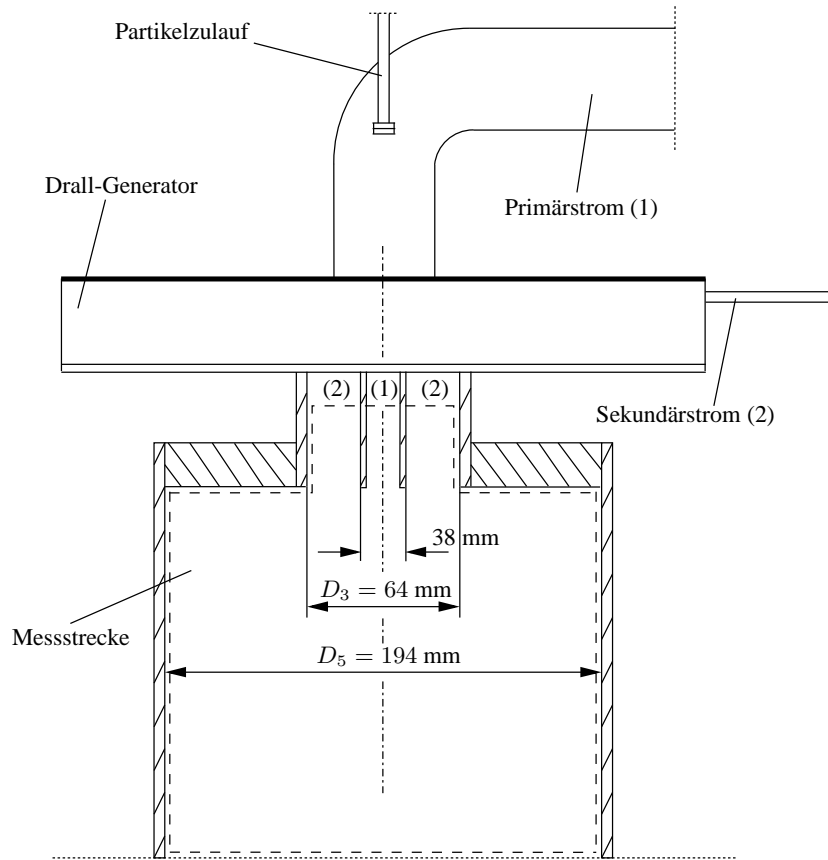


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung der Versuchsanlage von Sommerfeld und Qiu [181]

die numerische Abbildung beider Testfälle bis auf die Berücksichtigung zusätzlicher Transportgleichungen identisch. Somit werden die verwendeten Randbedingungen in Tabelle 7.3 in Kapitel 7 zusammengefasst. Des Weiteren wird zur numerischen Abbildung des den Primär- und Sekundärstrom trennenden Rings die sogenannte Methode der „eingetauchten“ Wände [75] verwendet. Als mittleres Profil der Einströmung wird jeweils ein Blockprofil mit der maximalen Durchströmungsgeschwindigkeit des Primärstroms von $U_{B,1} = 12,5 \text{ m/s}$ und des Sekundärstroms von $U_{B,2} = 18 \text{ m/s}$ verwendet. Um Turbulenz zu erzeugen, wird das vorgegebene Geschwindigkeitsfeld mit randomen Störungen am Einstromrand überlagert:

$$u_{1,\text{rms}} = 0,5\%, \quad u_{2,\text{rms}} = 0,5\%, \quad u_{3,\text{rms}} = 0,5\%. \quad (6.2)$$

Für die Simulationen werden 300000 numerische Partikel verwendet, so dass ein numerisches Partikel l je nach vorgegebener Massenstromdichte maximal $N_{d,l} = 100$ reale Partikel abbildet. Die Startbedingungen in Bezug auf die Partikel-Geschwindigkeiten und deren Standardabweichung

chungen werden in Abhängigkeit des Radius, basierend auf den Messwerten vorgegeben. Weitere Details hierzu sind der von Sommerfeld & Qiu angegebenen Referenz zu entnehmen [181].

6.3 Berechnungsergebnisse

In den folgenden Abschnitten werden die Simulationsergebnisse den experimentellen Daten gegenübergestellt. Dabei wird zunächst das Geschwindigkeitsfeld der fluiden und der dispersen Phase und die Standardabweichungen der Geschwindigkeitskomponenten betrachtet. Daran anschließend wird die Verteilung des Partikeldurchmessers entlang der Messstrecke beschrieben und diskutiert, inwieweit Simulation und Experiment übereinstimmen. Die erste radiale Messebene $x = 0,003$ m in den folgenden Abbildungen liegt hierbei 0,003 m stromab des den Primär- und Sekundärstrom trennenden Rings (siehe. Abb. 6.1).

6.3.1 Geschwindigkeitsfeld der Trägergasphase

Im Rahmen des Euler-Lagrange-Verfahrens ist eine gute Beschreibung des Geschwindigkeitsfeldes der Trägergasphase für eine qualitativ gute, numerische Beschreibung der Feldgrößen der dispersen Phase maßgebend. In Abbildung 6.2 ist die mittlere axiale Geschwindigkeit $\langle u_1 \rangle$ dargestellt. Für $x = 0,052$ m und $x = 0,085$ m zeigen die experimentellen Daten gegenüber den numerischen Resultaten eine größere Aufweitung der Drallströmung. Für die weiter stromab gelegenen radialen Profile ist die Übereinstimmung sehr gut. Der Staupunkt, bei dem der Primärstrom auf die Fluidmasse trifft, die aufgrund der sich einstellenden Rezirkulationszone gemeinhin zentral zurückgeführt wird, ist gekennzeichnet durch eine axiale Geschwindigkeit von $\langle u_1 \rangle = 0$ m/s. Diese liegt zwischen $x = 0,085$ m und $x = 0,112$ m. Aufgrund der guten Übereinstimmung der numerischen Profile mit den Messdaten bei $x = 0,085$ m und $x = 0,112$ m, ist von einer guten axialen Bestimmung des Staupunktes auszugehen. Prinzipiell ergibt sich eine gute Übereinstimmung der experimentellen Daten mit den Ergebnissen der LES. Insbesondere wird deutlich, dass die LES ein sehr großes Potential hat, eine komplexe Strömung vorherzusagen. Für die mittlere tangential Geschwindigkeit $\langle u_2 \rangle$ in Abbildung 6.3 wird für $x = 0,052$ m die Geschwindigkeit überschätzt. Für alle anderen Profile ist die Übereinstimmung sehr gut. Die mittlere radiale Geschwindigkeit $\langle u_3 \rangle$, welche in Abb. 6.4 dargestellt ist, wird gleichfalls sehr gut beschrieben, wenn auch bei $x = 0,052$ m das Maximum nicht mit den experimentellen Daten übereinstimmt. Hier zeigen diese eine größere Aufweitung der Drallströmung.

In den Abbildungen 6.5 - 6.7 sind die Standardabweichungen der Geschwindigkeitskomponenten dargestellt. Alle drei Komponenten werden in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Daten bestimmt. Auch die Maxima der zweiten Momente für $\langle u_1 \rangle$, $\langle u_2 \rangle$ und $\langle u_3 \rangle$ stimmen mit den vermessenen Daten überein. Aufgrund dessen, dass die Beschreibung der Turbulenz am Einstromrand vergleichsweise unphysikalisch ist, ist dies nicht unbedingt zu erwarten. Durch die rein zufällige Verteilung dieser Schwankungen befindet sich der wesentliche Anteil dieser Fluktuationen im Bereich der Filterweite. Dies ist jedoch der Bereich, in dem das Fein-

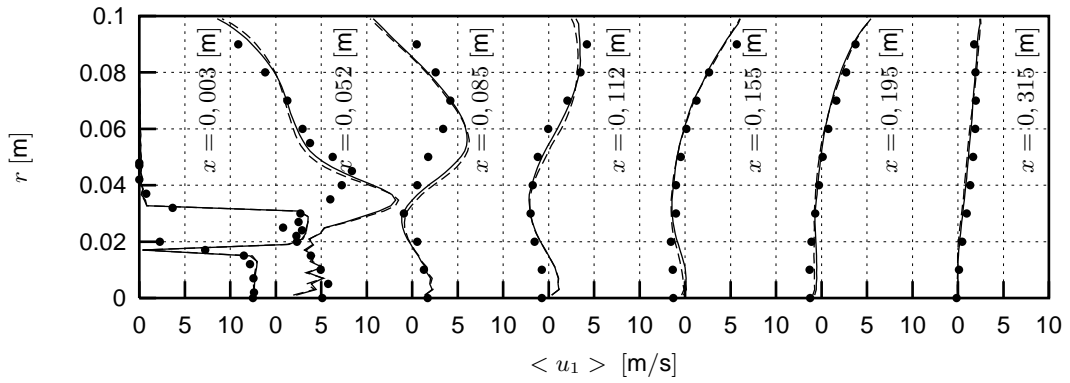


Abbildung 6.2: Mittlere axiale Geschwindigkeit der Trägergasphase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

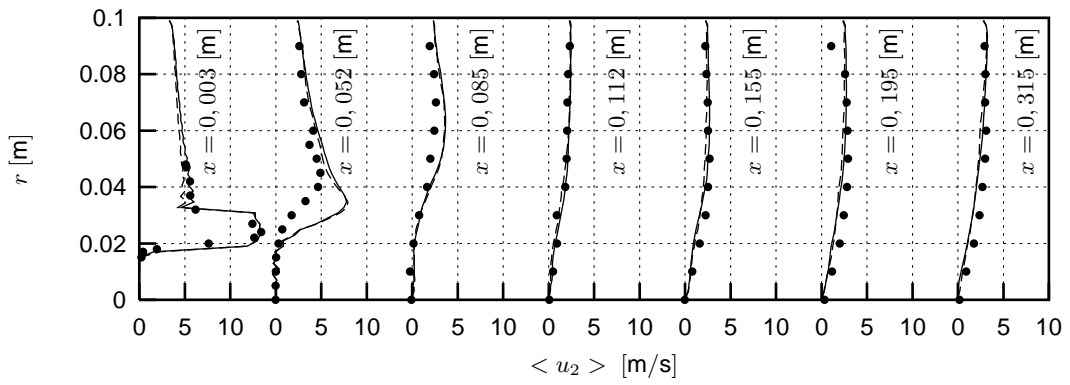


Abbildung 6.3: Mittlere tangentielle Geschwindigkeit der Trägergasphase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

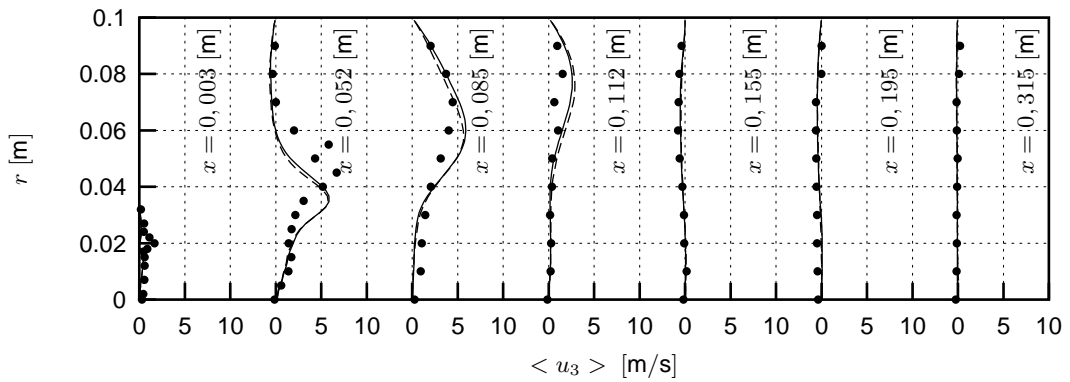


Abbildung 6.4: Mittlere radiale Geschwindigkeit der Trägergasphase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

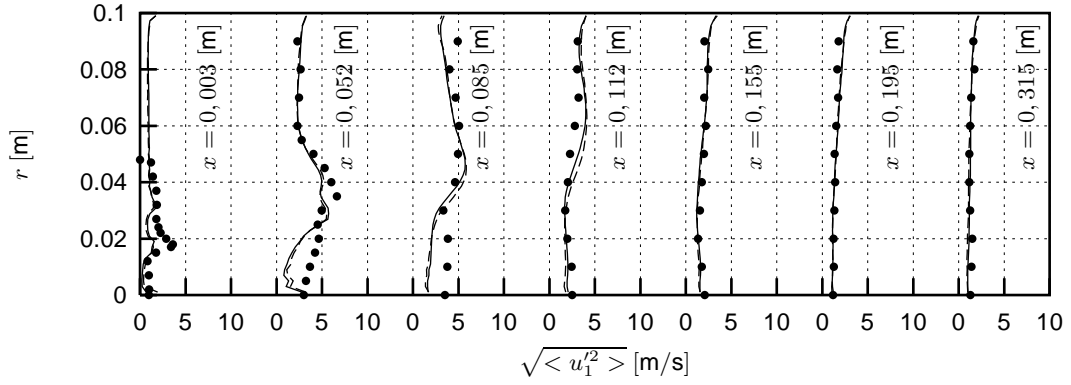


Abbildung 6.5: Mittlere Standardabweichung der axialen Geschwindigkeit der Trägergasphase:
Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

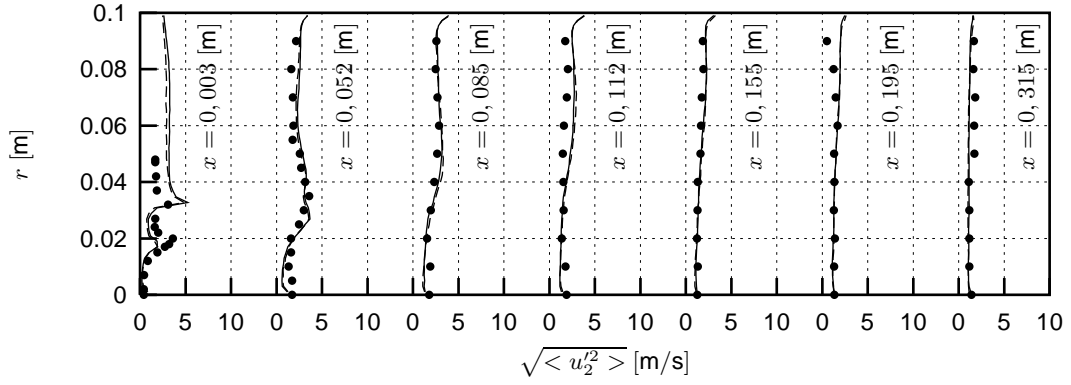


Abbildung 6.6: Mittlere Standardabweichung der tangentialen Geschwindigkeit der Trägergasphase:
phase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

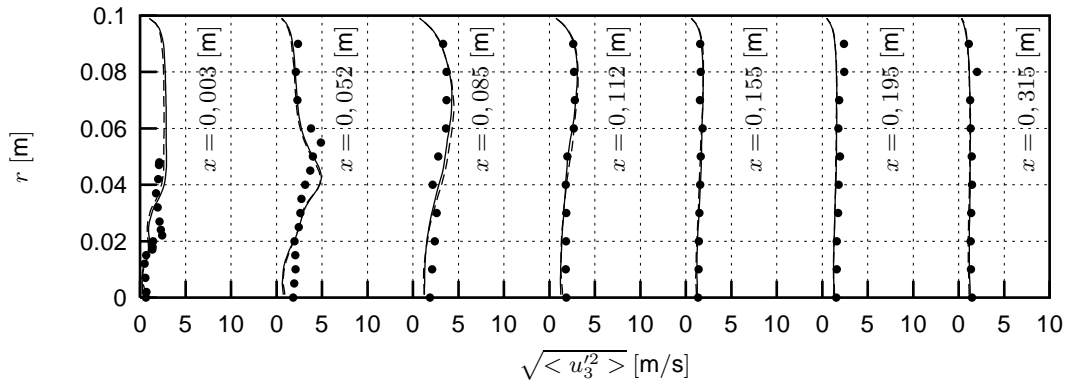


Abbildung 6.7: Mittlere Standardabweichung der radialen Geschwindigkeit der Trägergasphase:
Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

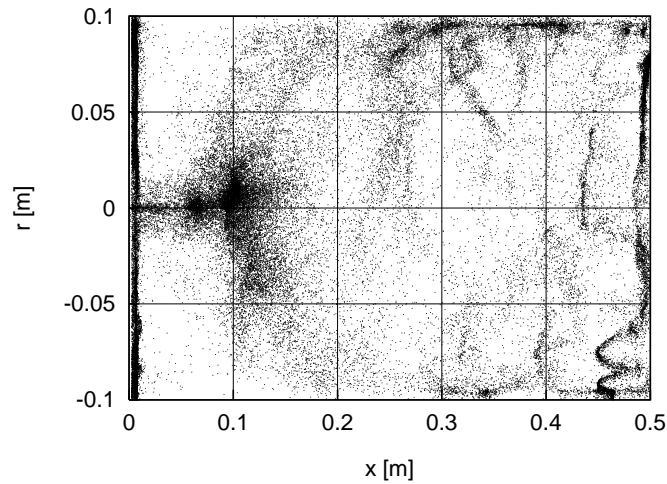


Abbildung 6.8: Momentaufnahme der Verteilung der dispersen Phase

strukturmodell wirkt und die Fluktuationen aufgrund der turbulenten Viskosität dissipiert werden. Hinzu kommt die Tatsache, dass die turbulenten Schwankungen die Kontinuitätsgleichung nicht erfüllen, und somit nach der Druckkorrektur größtenteils beseitigt sind.

Die im Rahmen dieser Fallstudie verwendeten Varianten der Feinstrukturmodellierung und die Berücksichtigung der Effekte der dispersen Phase zeigen einen geringen Einfluss auf die numerische Vorhersage der zweiten Momente der Trägergasphasen-Geschwindigkeitskomponenten. Dieses Resultat ist bei den verwendeten Partikeldurchmessergrößen zu erwarten, da der Anteil der Turbulenzproduktion aufgrund der Durchmessergrößen gering ist, und vielmehr eine Turbulenzabschwächung eintritt. Für die vorliegende Strömung ist insbesondere die Interaktion der Partikelphase mit dem Phänomen der Verdrallung bestimmend, so dass Turbulenzmodulations-effekte in den Hintergrund treten.

6.3.2 Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase

Nachdem in dem vorangegangenen Abschnitt 6.3.1 das Geschwindigkeitsfeld des Trägergases eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten zeigte, sollte für die numerische Vorhersage der Partikelfeldgrößen, wie beispielsweise die Partikel-Geschwindigkeitskomponenten, eine gute Basis vorliegen. In Abbildung 6.9 ist zunächst die axiale Komponente dargestellt. Bis zu einem Radius von $r = 0,02$ m entlang der Symmetrieachse in Strömungsrichtung werden die Partikel aufgrund ihrer vorgegeben Startgeschwindigkeit $u_{d,1,in}$ zunächst durch den Primärstrom getragen, im weiteren axialen Verlauf dann jedoch sehr stark durch die axial entgegen wirkende Strömung der Rezirkulationszone abgebremst. In einem Bereich um $x = 0,112$ m sammeln sich die Partikel an (siehe Abb. 6.8), um dann mit dem sekundären Strom nach außen hin transportiert zu werden (wieder ansteigende axiale Geschwindigkeit $\langle u_{d,1} \rangle$ für $r > 0,03$ m bei $x = 0,052$ m).

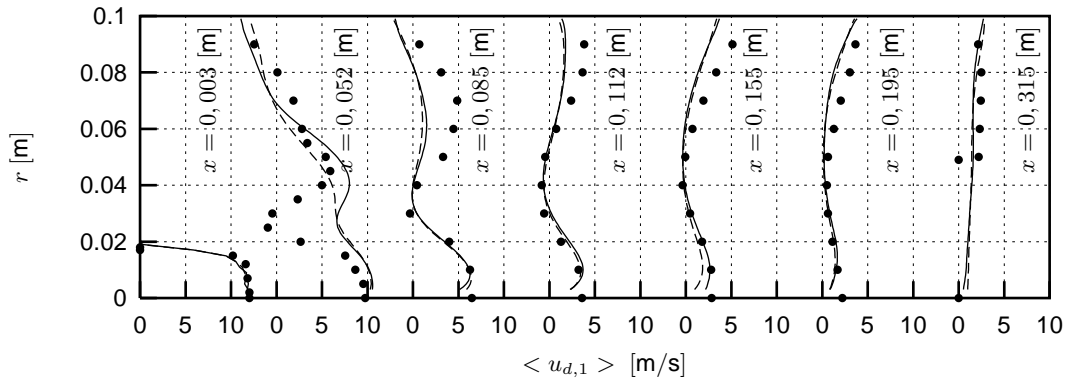


Abbildung 6.9: Mittlere axiale Geschwindigkeit der dispersen Phase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

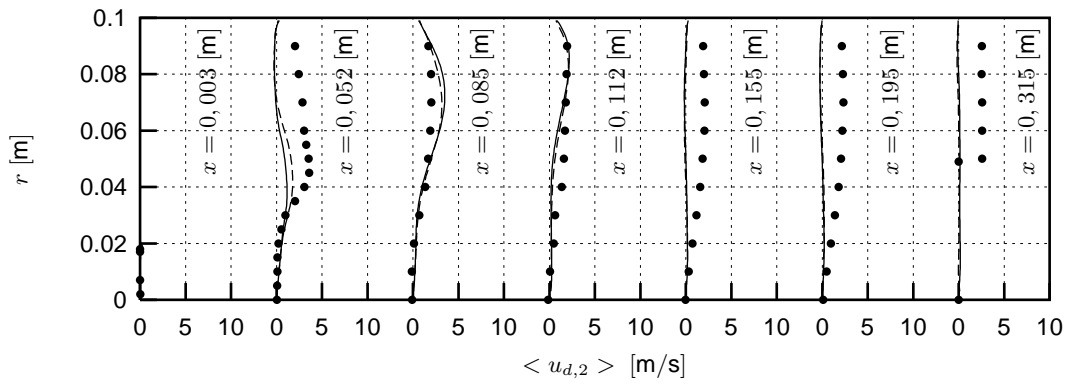


Abbildung 6.10: Mittlere tangentielle Geschwindigkeit der dispersen Phase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

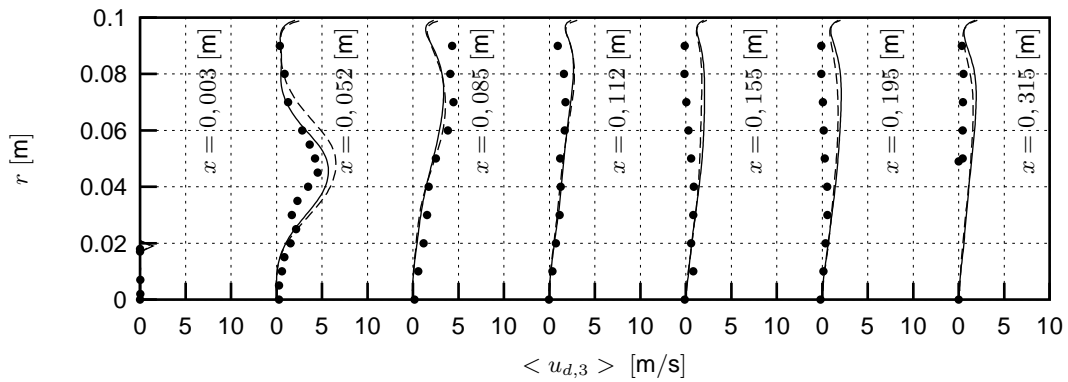


Abbildung 6.11: Mittlere radiale Geschwindigkeit der dispersen Phase: Exp.:•; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

Für die tangentielle Geschwindigkeit $\langle u_{d,2} \rangle$ ergibt sich für $x \leq 0,112$ m eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den Messdaten, während für $x > 0,112$ m die numerischen Partikel in Umfangsrichtung eine geringere Geschwindigkeitskomponente aufweisen, als dies im Experiment zu sehen ist (Abb. 6.10). In Abbildung 6.11 wird für $x = 0,052$ m und $x = 0,085$ m der Transport der dispersen Phase nach außen zur Wand hin durch erhöhte Radialgeschwindigkeiten $\langle u_{d,3} \rangle$ deutlich. Für alle axialen Positionen ist die bestimmte Geschwindigkeit gegenüber den Messdaten vergleichsweise zu gering. Bei $x = 0,315$ m werden im Experiment aufgrund des beschriebenen Transports der dispersen Phase zur äußeren Wand hin für $r < 0,045$ m zu wenig Partikel für eine ausreichende Statistik gefunden.

6.3.3 Verteilung des Partikeldurchmessers

Für die in Abbildung 6.12 dargestellte Verteilung des Partikeldurchmessers ergibt sich für $x = 0,003$ m ein homogenes Profil des mittleren Partikeldurchmessers von $\langle D_d \rangle = 45,5 \cdot 10^{-6}$ m. Im weiteren axialen Verlauf wird die disperse Phase, deren Durchmessergrößenverteilung in einem Bereich von $20 \cdot 10^{-6}$ m bis $80 \cdot 10^{-6}$ m liegt, separiert. Dabei ist in Abbildung 6.12 zu sehen, dass vergleichsweise große Partikel aufgrund ihrer Trägheit sich im inneren Bereich entlang der Hauptströmungsrichtung sammeln, und erst „langsam“ in Richtung Wand nach außen hin wandern. Die kleineren Partikel folgen der Strömung aufgrund einer geringeren Trägheit und werden mit der Strömung zur Wand hin transportiert. Die Partikel sammeln sich aufgrund der vorherrschenden Strömung in einem Bereich $x = 0,195$ m an und folgen der Rezirkulation nach innen und dann zurück, entgegen den aus dem inneren Ring austretenden Primärstrom. Somit entsteht ein Kreislauf, dem die vergleichsweise großen Partikel nicht zu folgen vermögen. Die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ist für den gemittelten Partikeldurchmesser $\langle D_d \rangle$ zufriedenstellend. Für $x = 0,052$ m und im Weiteren für $x = 0,112$ m bis $x = 0,195$ m ist jedoch der numerisch bestimmte Partikeldurchmesser insbesondere für $r > 0,02$ m zu groß.

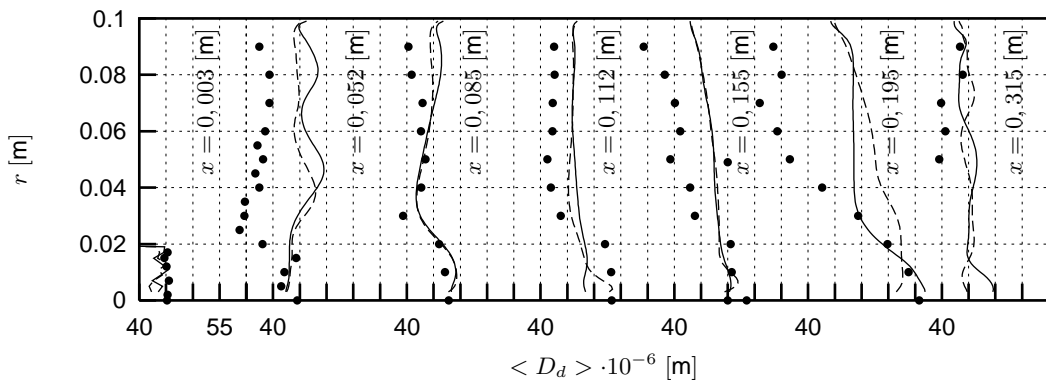


Abbildung 6.12: Mittlerer Partikeldurchmesser: Exp.: •; LES: Smagorinsky: —, Yoshizawa: ---

Resümee

Aufgrund der sehr guten Übereinstimmung des Geschwindigkeitsfeldes der dispersen und insbesondere der fluiden Phase wird die numerische Vorhersage der Partikeldurchmessergrößenverteilung in zufriedenstellender Weise getroffen. Deutlich wird das unterschiedliche Verhalten von vergleichsweise großen und kleinen Partikeln. Während bei großen Partikel die Massenträgheit dazu führt, dass diese unbeeindruckt von den umgebenden Wirbeln diese durchkreuzen und ihrer eigenen Bahn folgen („crossing-trajectory“-Effekt), die sie nach und nach in die äußeren, wandnahen Bereiche bringt, folgen kleinere Partikel der Strömung vergleichsweise direkter. Insbesondere werden diese in den Kern der Rezirkulation „gezogen“, um dann aufgrund der Zentrifugalkraft nach außen transportiert zu werden. Somit entsteht quasi ein Kreislauf, den die numerische Simulation gut zu beschreiben vermag.

7 Simulation eines verdampfenden Sprühnebels in einer heißen Luftströmung

Inhalt dieses Kapitels ist die Untersuchung des Verdampfungs- und des Dispersionsverhaltens von Flüssigkeitstropfen in einer turbulenten Strömung. Im Vergleich zu den Kapiteln 5 und 6, in deren Rahmen einzig Feststoffpartikel betrachtet wurden, finden innerhalb der folgenden Abschnitte die Euler'schen Gleichungen zur Bilanzierung des Wärme- und des Stoffeintrages (Enthalpie und Massenbruch des verdampfenden Mediums) in der Trägergasphase sowie die Lagrange'schen Gleichungen zur Beschreibung des Tropfendurchmessers und der Tropfentemperatur Verwendung (vgl. Kapitel 4.2). Zudem werden die im Anhang (Kapitel 9) dargestellten Polynom-Approximationen zur Beschreibung der Tropfeneigenschaften verwendet. Die Resultate der numerischen Simulation werden mit den Ergebnissen einer experimentellen Studie von Sommerfeld & Qiu [182] verglichen. Die LES-Simulation wird mit der Smagorinsky-Feinstrukturmodellierung durchgeführt.

7.1 Beschreibung der Konfiguration

Sommerfeld & Qiu wählten für ihre Studie eine beheizte Ringkonfiguration, in deren hohlen Kegel eine Sprühdüse angeordnet war (Abb. 7.1). Aufgrund hoher Verdampfungsraten verwendeten sie als Verdampfungsflüssigkeit Isopropanol-Alkohol. Mit der Methode der Phasen-Doppler-Anemometrie (PDA) wurden Tropfendurchmesser und Tropfendurchmessergeschwindigkeits-Korrelationen vermessen. Aus diesen lokalen Messungen wurden über Mittelungen aus allen Tropfengrößenklassen Profile für Fluid- und Partikelgeschwindigkeitskomponenten, deren Varianzen sowie der Tropfendurchmesser erhalten. Insbesondere wurden die Einlassbedingungen für die Gasphasen- und Tropfengeschwindigkeitskomponenten sowie die vorherrschende Wandtemperatur vermessen. Das Geschwindigkeitsfeld der Gasphase und der dispersen Phase wurden getrennt voneinander vermessen. Sommerfeld und Qiu geben hierfür folgende Gründe an:

- Die Anzahl der aufgrund der Verdampfung natürlich vorkommenden Tropfen, welche mit einem Durchmesser von $D_d = 3 \cdot 10^{-6}$ m der Trägergasströmung als Indikator folgen können, ist gering. Zusätzlich sind die Tropfen in der Messstrecke inhomogen verteilt, so dass lokale Bereiche vorliegen können, in denen keine Tropfen vorkommen.

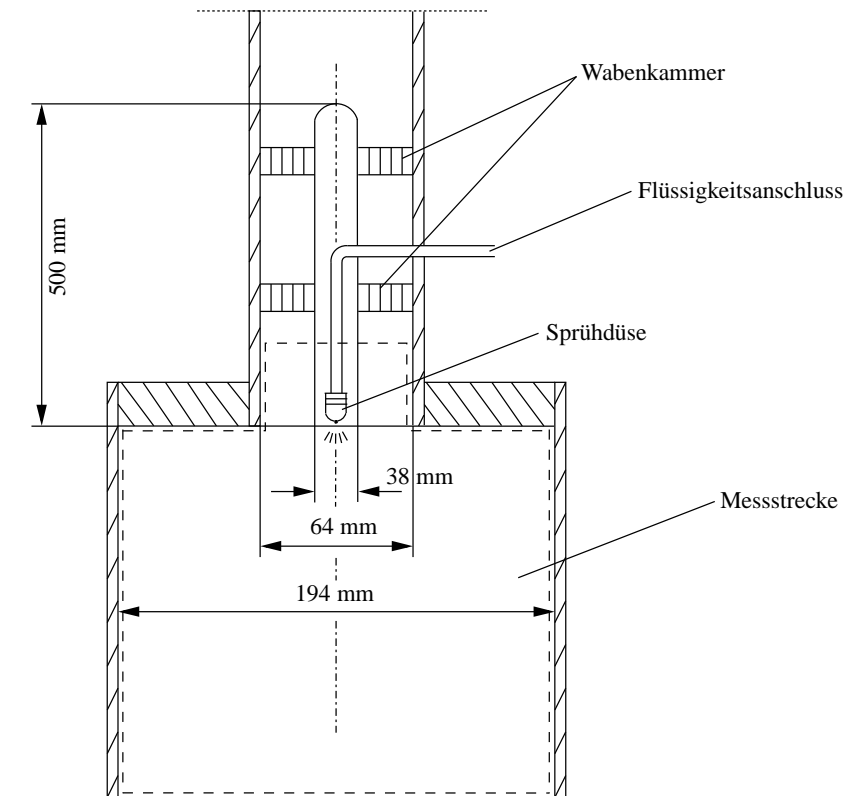


Abbildung 7.1: Schematische Darstellung der Versuchsanlage von Sommerfeld und Qiu [182]

- Die Zugabe von festen „tracer“-Partikel beeinflusst den Verdampfungsprozess aufgrund von Agglomerationsphänomenen bei verdampfenden Tropfen.

Somit ergeben sich im Rahmen dieses Kapitels zwei betrachtete Konfigurationen, die für die Einphasenströmung in Tabelle 7.1 und für die Mehrphasenströmung in Tabelle 7.2 zusammengefasst sind.

7.2 Numerische Abbildung

Für die Simulationen wird der in Abbildung 7.1 gestrichelt dargestellte Bereich mit $193 \times 32 \times 52 = 319488$ Zellen diskretisiert. Die Diskretisierung und die Ausdehnung des verwendeten Gitters entspricht aufgrund der geometrischen Übereinstimmung des Rechengebiets der in Kapitel 6 beschriebenen Konfiguration (siehe hierzu Kap. 6.2). Als mittleres Profil der Einströmung wird ein Blockprofil mit der maximalen Strömungsgeschwindigkeit von $U_B = 18$ m/s gewählt. Um Turbulenz zu erzeugen, wird das vorgegebene Geschwindigkeitsfeld mit randomen

Tabelle 7.1: Strömungskonditionen für die Einphasenströmung

<i>Gasphase</i>	
Volumenstrom	0,032 m ³ /s
Massenstrom	0,0229 kg/s
Max. Geschwindigkeit	18 m/s
Max. Temperatur	373,15 K

Tabelle 7.2: Strömungskonditionen für die Mehrphasenströmung

<i>Trägergasphase</i>	
Volumenstrom	0,034 m ³ /s
Massenstrom	0,0326 kg/s
Max. Geschwindigkeit	18 m/s
Max. Temperatur	353,15 K
<i>Disperse Phase</i>	
Massenstrom	0,00044 kg/s
Temperatur am Düsenaustritt	305,15 K

Tabelle 7.3: Verwendete Randbedingungen für die Hohlkegelströmung

Hohlkegelströmung			
Richtung/Ort	Koordinate	Größe	Randbedingung
Einstromrand	x	$\bar{\rho}\tilde{u}_1, \bar{\rho}\tilde{u}_2, \bar{\rho}\tilde{u}_3$	Dirichlet, instationär
Ausstromrand		$\bar{\rho}\tilde{y}, \bar{\rho}\tilde{h}, \bar{P}, \nu_{\text{eff.}}, \tilde{c}_p$	Gradient = 0
		$\bar{\rho}\tilde{u}_1$	Gradient = 0, aber $\bar{\rho}\tilde{u}_1 \geq 0$
		$\bar{\rho}\tilde{u}_2, \bar{\rho}\tilde{u}_3$	Gradient = 0
		$\bar{\rho}\tilde{y}, \bar{\rho}\tilde{h}, \bar{P}, \nu_{\text{eff.}}, \tilde{c}_p$	konstant = 0
Umfang	φ	alle	periodisch
Achse	r	alle	Gradient = 0
Seitenrand		$\bar{\rho}\tilde{u}_3$	Haftbedingung ($\tilde{u}_3 = 0$)
		$\bar{\rho}\tilde{u}_1, \bar{\rho}\tilde{u}_2$	Haftbedingung mit No-Slip-Modellierung
		$\bar{\rho}\tilde{y}, \bar{\rho}\tilde{h}, \bar{P}, \nu_{\text{eff.}}, \tilde{c}_p$	konstant = 0

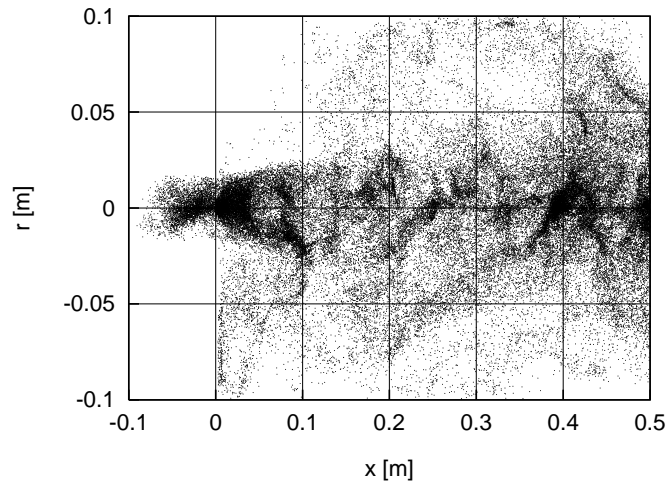


Abbildung 7.2: Momentaufnahme der Verteilung der dispersen Phase

Störungen am Einstromrand, wie in Kapitel 6.2 beschrieben, überlagert. Des Weiteren wird zur numerischen Abbildung des den Primär- und Sekundärstrom trennenden Rings die sogenannte Methode der „eingetauchten“ Wände [75] verwendet. Die für diese Fallstudie verwendeten Randbedingungen für die Euler’schen Transportgleichungen sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst. Für die Simulation wurden 300000 numerische Partikel verwendet, weitere Details zu den Startbedingungen der dispersen Phase sind der von Sommerfeld & Qiu angegebenen Referenz zu entnehmen [182].

7.3 Berechnungsergebnisse

In dem folgenden Abschnitt wird zunächst das Geschwindigkeitsfeld der Gasphase gezeigt. Um gemeinhin eine gute Übereinstimmung der gemessenen Tropfendispersion und des Geschwindigkeitsfeldes der dispersen Phase mit dem Experiment zu erhalten, ist es von grundlegender Bedeutung, das Geschwindigkeitsfeld der Gasphase in Übereinstimmung mit den Messdaten vorherzusagen.

7.3.1 Geschwindigkeitsfeld der Gasphase

In Abbildung 7.3 ist die axiale Geschwindigkeitskomponente der Gasphase dargestellt. Sehr gut ist die Aufweitung des Hohlkegelströmung in radialer Richtung, die von der LES gegenüber den experimentellen Daten sehr gut wiedergegeben wird. Für $x = 0,025$ m ist für $r < 0,02$ m $\langle u_1 \rangle$ negativ, die Strömung folgt dem Einlasskanal, in dem die Tropfeneinspritzdüse angebracht ist, zurück. Diese Rückströmung ist für die Dispersion der dispersen Phase von Bedeutung, da jeder individuelle Tropfen je nach seiner initiierten Trägheit der Strömung zurück in den Einlasskanal

folgt oder in die axiale Hauptströmungsrichtung transportiert wird (siehe Abb. 7.2). In Abbildung 7.4 ist die tangentielle Komponente der Gasphasen-Geschwindigkeit dargestellt. Für $x = 0,025$ m und $x = 0,050$ m zeigen die Messdaten einen negativen Beitrag für $r < 0,025$ m, der in der Simulation aufgrund eines zu Null vorgegebenen Startfeldes nicht beschrieben wird. Für $x > 0,050$ m ist die Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung sehr gut. Während die tangentielle Geschwindigkeitskomponente sehr klein ist, ist insbesondere die axiale Geschwindigkeit für den Transport der Tropfenphase von Bedeutung. Neben der axialen Geschwindigkeit

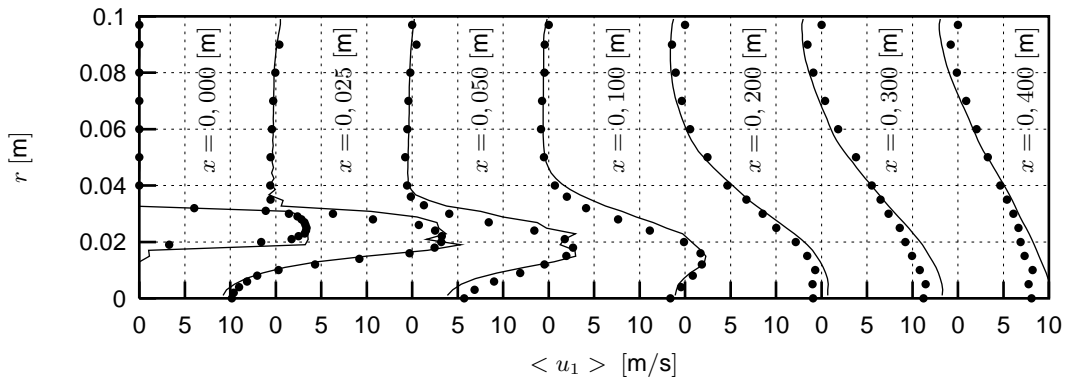


Abbildung 7.3: Mittlere axiale Geschwindigkeit der Gasphase: Exp.:•; LES: —

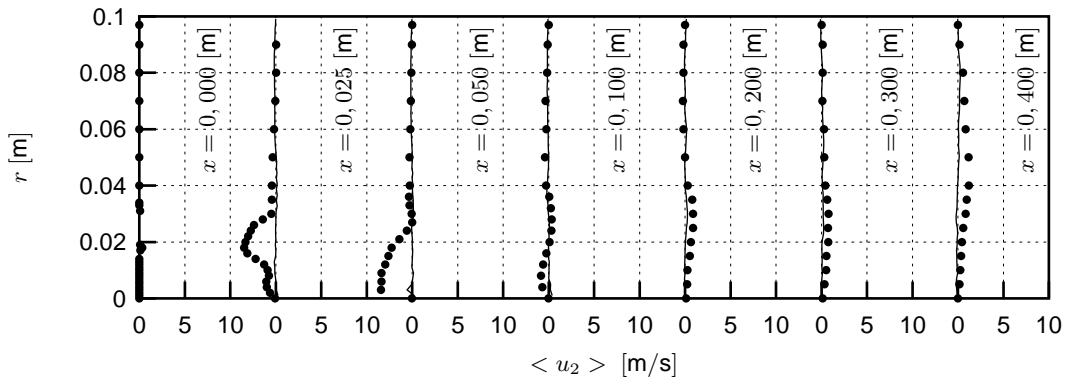


Abbildung 7.4: Mittlere tangentielle Geschwindigkeit der Gasphase: Exp.:•; LES: —

sind zudem die zweiten Momente der Geschwindigkeitskomponenten für die Vorhersage der Tropfenverteilung sehr wichtig. Die numerische Vorhersage der Turbulenzintensität ist hierbei insbesondere abhängig von einer vergleichsweise feinen numerischen Gitterauflösung. Je kleiner die Wirbel sind, die im Rahmen einer LES aufgelöst werden, desto qualitativ besser ist die Beschreibung der numerischen Tropfendispersion. In Abbildung 7.5 und 7.6 sind die zweiten

Momente der Geschwindigkeitskomponenten $\langle u_1 \rangle$ und $\langle u_2 \rangle$ dargestellt. Die Übereinstimmung mit den Messdaten ist für alle radiale Profile sehr gut. Zudem wird das Geschwindigkeitsfeld der Gasphase mit einer sehr guten Übereinstimmung gegenüber den Messdaten beschrieben, so dass für die im folgenden Abschnitt 7.3.2 dargestellten numerischen Resultate des Geschwindigkeitsfeldes der dispersen Phase eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten erwartet werden kann.

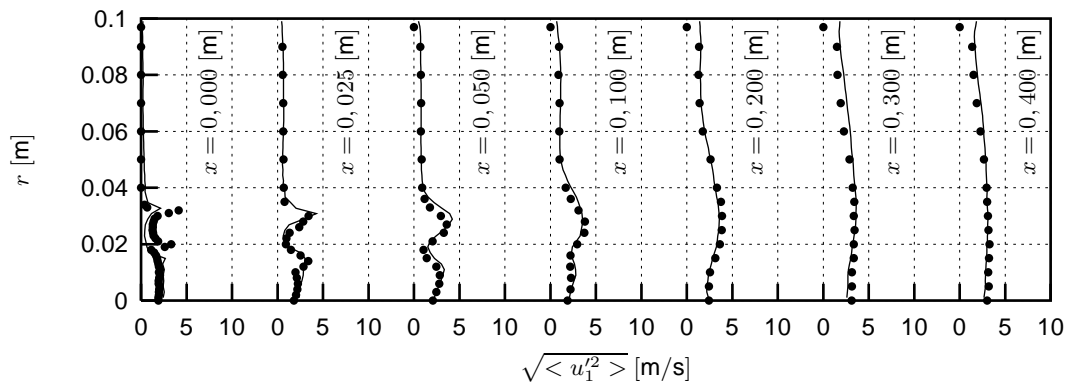


Abbildung 7.5: Mittlere Standardabweichung der axialen Geschwindigkeit der Gasphase: Exp.: •; LES: —

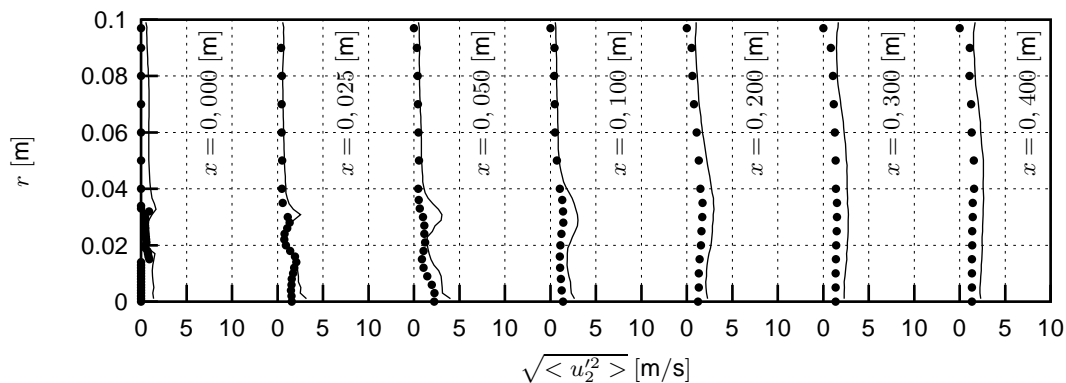


Abbildung 7.6: Mittlere Standardabweichung der tangentialen Geschwindigkeit der Gasphase: Exp.: •; LES: —

7.3.2 Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase

Anhand der Abbildungen 7.7 und 7.8 ist die Aufweitung des aus der Düse austretenden Tropfenstrahls sehr schön dokumentiert. Die mit einer axialen und einer gemäß von Sommerfeld

& Qiu für eine numerische Vergleichsrechnung vorgeschlagene zu Nullsetzung der tangentialen Startgeschwindigkeit (Sommerfeld und Qiu sprechen in diesem Zusammenhang von einer experimentellen Messunsicherheit in Bezug auf die Bestimmung der tangentialen Tropfen-Startgeschwindigkeit, siehe Abb. 7.8) aus der Düse austretenden Tropfen werden zunächst aufgrund der Rückströmung der Trägergasphase in den Einlasskanal stark abgebremst. Im weiteren Verlauf steigt die axiale Tropfengeschwindigkeit entlang der Symmetrieachse wieder an und der Gradient der radialen Profile wird nach außen hin flacher. Insgesamt treffen die radialen Profile die axiale und tangentialen Tropfengeschwindigkeit der Messdaten sehr gut.

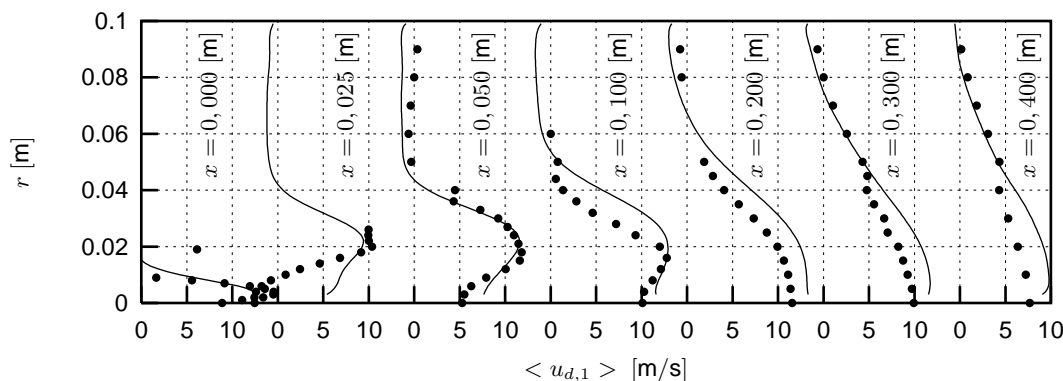


Abbildung 7.7: Mittlere axiale Geschwindigkeit der dispersen Phase: Exp.:•; LES: —

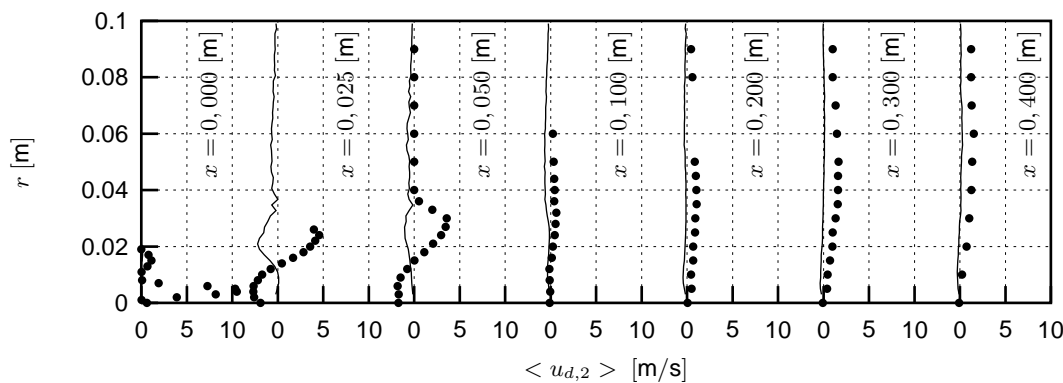
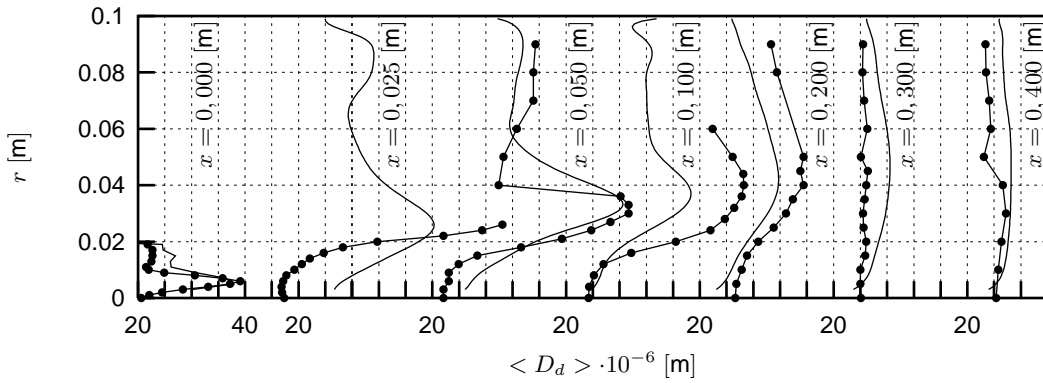


Abbildung 7.8: Mittlere tangential Geschwindigkeit der dispersen Phase: Exp.:•; LES: —

7.3.3 Verteilung des Tropfendurchmessers

In Abbildung 7.9 ist für verschiedene axiale Positionen das jeweilige radiale Profil der Tropfen-größenverteilung dargestellt. Die aus der Düse austretenden Tropfen werden hierbei in einem

Abbildung 7.9: Mittlerer Tropfendurchmesser: Exp.: \bullet ; LES: —

Bereich von $20 \cdot 10^{-6} \text{ m} \leq D_d \leq 40 \cdot 10^{-6} \text{ m}$ gemäß der von Sommerfeld & Qiu gemessenen Größenverteilung und deren Standardabweichung einzelner Tropfengrößenklassen γ in Abhängigkeit des Radius r vorgegeben. Die Entwicklung des gemessenen Tropfendurchmessers hängt von den umgebenden Bedingungen des einzelnen Tropfens sowie von den gemessenen Tropfenstartbedingungen ab. Dass die gemessenen Tropfenstartbedingungen nicht in der Ebene gemessen wurden, in der sie gemeinhin injiziert werden, führt zu Abweichungen hinsichtlich der numerisch bestimmten Durchmesserverteilung. Es ist messtechnisch sehr schwierig, kurz nach der Einspritzdüse Tropfenstartbedingungen (Geschwindigkeit, Durchmesser, usw.) aufzunehmen, da insbesondere Phänomene wie beispielsweise die Tropfen-Agglomeration hierbei eine Rolle spielen. Somit müssen die gemessenen Profile extrapoliert werden, welche dann in der numerischen Simulation vorgegeben werden. Somit weist das gemessene Profil der dispersen Phase schon am Beginn der Tropfenverfolgung eine Differenz zu den real vorliegenden Tropfen auf. Des Weiteren bestimmt, wie auch Miller & Bellan [120] festgestellt haben, die numerische Vorhersage der Temperatur des Trägergasfeldes T_∞ die Durchmesserverteilung. Sie hat einen direkten Einfluss auf die Verdampfungsrate \dot{m}_v der dispersen Phase. Bestimmend für die Trägergasphasentemperatur ist neben der durch die Tropfenverdampfung sich abkühlende Umgebung auch das der Strömung zugrundeliegende Geschwindigkeitsfeld der Trägergasphase. Aufgrund der sich ausbildenden Rückströmung in den Einlasskanal der Tropfen folgen viele Tropfen dieser Rückströmung (Abb. 7.2). Dies führt dazu, dass in einem Bereich vor der Tropfendüse die Umgebung vergleichsweise stark abgekühlt wird und aufgrund geringer, bzw. negativer Trägergasgeschwindigkeiten die Verdampfungsrate \dot{m}_v vergleichsweise groß ist. Durch die Rückströmung und dem Folgen der Tropfen kühlt sich die Umgebung hinter der Düse stärker ab und auch der Massenbruch Y_∞ ist hinter der Düse vergleichsweise hoch. Somit ergibt sich für den Bereich der Tropfeneinspritzdüse eine vergleichsweise hohe Verdampfungsrate, die bis zu einem Bereich von $x < 0,2 \text{ m}$ zu einer Vorhersage mit verringerten Durchmessergrößen der Tropfenphase führt.

Für $x \geq 0,2$ m ist der berechnete Tropfendurchmesser gegenüber den experimentell bestimmten Tropfendurchmesser vergleichsweise groß. Da in diesem Bereich aufgrund der Verdampfung die Tropfendurchmesser absolut gesehen jedoch klein sind und der Schlupf zwischen dem Trägergas und den Tropfen gemeinhin gering ist, ergibt sich eine über die Partikel-Reynoldszahl-Abhängigkeit in der Sherwood-Korrelation Sh_0 in Gl. (4.49) zu geringe Abschätzung der Verdampfungsrate. Dies führt somit zu einer numerischen Vorhersage mit vergleichsweise hohen Tropfendurchmessergrößen.

Resümee

Insgesamt ergibt sich für die vorgestellte Fallstudie eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Messdaten. Das für die Beschreibung der Tropfenverdampfung verwendete Verdampfungsmodell basierend auf dem „uniform-temperature“-Ansatz, bei dem die innere Tropfentemperaturverteilung als homogen verteilt angenommen wird, vermag die Tropfengrößenverteilung des Experiments hinreichend gut abzubilden. Für die Vorhersage des Geschwindigkeitsfeldes der dispersen und der fluiden Phase ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung, so dass die Qualität der numerischen Simulation weniger durch die Dispersion der Tropfenphase bestimmt wird - hier hat die Methode der LES ein sehr großes Potential, die Verteilung der Tropfen adäquat und ohne größeren Aufwand gut zu beschreiben - vielmehr ist das verwendete Verdampfungsmodell ausschlaggebend. Durch die Verwendung des „uniform-temperature“-Ansatzes auf der Grundlage einer angenommenen, konstanten Filmdicke wird die Verdampfungsrate gemeinhin zu hoch abgeschätzt. Wie bereits in Ochs [129] und Miller et al. [121] diskutiert wurde, kann hier die Verwendung eines Verdampfungsmodells, welches den Einfluß der variablen Filmdicke in Betracht zieht (Abramzon & Sirignano [1]), zu kleineren Verdampfungsraten und damit zu verbesserten numerischen Vorhersagen des Tropfendurchmessers führen. Des Weiteren können neben den genannten Punkten auch Nichtgleichgewichtseffekte im Rahmen der Tropfenverdampfung eine Rolle spielen. Wie Chrigui et al. [18] gezeigt haben, führt die Berücksichtigung von diesen Effekten zu einer verbesserten Vorhersage der Verdampfungsrate.

8 Zusammenfassung

Die angefertigte Arbeit befasst sich mit der Entwicklung und Anwendung numerischer Berechnungsverfahren für Fluid-Partikel-Strömungen mit und ohne Phasenübergang der dispersen Phase auf dem Gebiet der Strömungs- und Verfahrenstechnik.

Für die in Kapitel 1.4 beschriebene Zielsetzung a) - e) wurden folgende Bausteine in einem vorliegenden 3D-LES-Code eingefügt: Im Rahmen der Verwendung des Euler-Lagrange-Verfahrens wurde ein Zweiphasenmodul entwickelt und validiert (a). Die Berechnung der kontinuierlichen Phase wurde hierbei mit der Methode der Grobstruktursimulation, bei der die zugrunde gelegten Transportgleichungen über eine Filteroperation direkt gelöst werden, durchgeführt. Die disperse Phase wurde im Rahmen des Lagrange'schen Ansatzes als ein Kollektiv von individuellen Partikeln betrachtet. Aus der Berechnung einer Vielzahl von Partikeltrajektorien im Strömungsfeld wurden durch eine geeignete Ensemblemittelung sowohl Kenngrößen, als auch Phasenwechselwirkungsterme für die Impuls-, Masse- und Wärmeübertragung abgeleitet.

Wesentlicher Inhalt der vorliegenden Arbeit war die numerische Untersuchung von instationären Phasenwechselwirkungsphänomenen zwischen dem Trägergas und der dispersen Phase. Insbesondere wurden die aus experimentellen und auch vorangegangenen numerischen Untersuchungen bekannten Phänomene der Turbulenzmodulation (Abschwächung und Anfachung der induzierten Turbulenz aufgrund der Anwesenheit der dispersen Phase) untersucht. Die numerische Abbildung der Phasenwechselwirkungen zwischen den Phasen fand in Form von Quelltermen für die Euler'schen Transportgleichungen der Masse, des Impulses, der Enthalpie und des Massenbruchs des verdampfenden Stoffes Berücksichtigung (b). Die Methode, die für die numerische Beschreibung der Turbulenzmodulation verwendet wurde, beinhaltete die Adaption der im Rahmen der Grobstruktursimulation zu modellierenden Feinstruktur-turbulenz für Mehrphasensysteme. Dazu wurde die Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie der kleinen Skalen in den LES-Code implementiert, deren Koeffizienten mit einer dynamischen Methode bestimmt wurden (c). Für die Transportgleichung der Feinstrukturenergie wurde neben einer aus der Literatur bekannten (Standard-) Formulierung (Sankaran & Menon [158]) eine von Sadiki & Ahmadi [157] neu-vorgeschlagene Modellierung der Partikelquellterme verwendet, die im Vergleich auch das physikalische Phänomen der Turbulenzanfachung zu beschreiben in der Lage ist (d). Anhand zweier gut vermessener Fallstudien (homogen, isotrop abfallende Gitterturbulenz, Drallströmung) wurden folgende Ergebnisse erhalten:

1. Das Turbulenzmodulationsmodell von Sadiki & Ahmadi beschreibt das Phänomen der Turbulenzabschwächung qualitativ genauer als die von Sankaran & Menon [158] verwendete Formulierung der Partikelquellterme.

2. Zudem ist das Turbulenzmodulationsmodell von Sadiki & Ahmadi im Gegensatz zur Standardformulierung in der Lage, das Phänomen der Turbulenzanfachung sehr gut zu beschreiben.
3. Anhand von Energiespektren konnte die qualitativ verbesserte Beschreibung der Turbulenzmodulation (Abschwächung und Verstärkung der induzierten Turbulenz) bestätigt werden.
4. Der freie Modellparameter in der Partikelquelltermformulierung von Sadiki & Ahmadi wurde im Rahmen einer ersten Validierung zu $\alpha_k = 0,05$ sowohl zur Beschreibung der Turbulenzabschwächung als auch zur Beschreibung der Turbulenzverstärkung bestimmt. Um im Rahmen der dynamischen Feinstrukturmodellierung unabhängig von freien Modellparametern zu bleiben, ist die dynamische Bestimmung von α_k für zukünftige Arbeiten zu empfehlen. Diese wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht in Betracht gezogen, ist jedoch, wie Sadiki & Ahmadi gezeigt haben, prinzipiell möglich.

Festzuhalten bleibt, dass zur Beschreibung der in einem Fluid-Partikel-System induzierten Turbulenz, und um im Hinblick gegenüber experimentellen Studien eine verbesserte Übereinstimmung zu erhalten, der Anteil der turbulenten kinetischen Energie, der aufgrund der Turbulenzproduktion entsteht, im Rahmen der numerischen Modellierung nicht zu vernachlässigen ist. Die Modellformulierung von Sadiki & Ahmadi berücksichtigt dies in einem Produktionsterm in Gl. (4.79) und zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den beschriebenen, experimentellen Studien.

Im zweiten Teil der vorliegenden Arbeit wurde für die numerische Untersuchung von Verdampfungsphänomenen ein Verdampfungsmodell in das Zweiphasenmodul integriert und verifiziert (e). Das verwendete Verdampfungsmodell basiert auf dem „uniform-temperature“-Ansatz, in dessen Rahmen eine unendlich große Wärmeleitfähigkeit für einen Tropfen angenommen wird. Anhand einer bezüglich bereitgestellter Tropfen-Anfangsbedingungen gut vermessenen Fallstudie (Verdampfung eines Sprühnebels in einer heißen Luftströmung) wurden folgende Ergebnisse erhalten:

1. Die numerische Vorhersage der Trägergasgeschwindigkeitsprofile und das Geschwindigkeitsfeld der dispersen Phase ergibt eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten.
2. Die Verteilung des Partikeldurchmessers entlang der Messstrecke wird in guter Übereinstimmung mit den Messdaten bestimmt. Die teilweise zu geringe numerische Partikeldurchmessergröße ist, wie auch Miller & Bellan [121] bestätigen, durch die Verwendung eines Verdampfungsmodells, welches den Einfluß einer angenommenen, konstanten Filmdicke in Betracht zieht, sowie auf die Nichtberücksichtigung von Nichtgleichgewichtseffekten im Rahmen der Tropfenverdampfung zurückzuführen. Hier könnte, wie Chrigui et al. [18] in ihrer Arbeit anhand der RANS-Simulation dieser Fallstudie gezeigt haben, die Modellierung von Knudsen & Langmuir zu einer geringeren Verdampfungsrate und damit zu einer genaueren Übereinstimmung mit dem Experiment führen.

9 Anhang

9.1 Stoffkonstanten und als konstant verwendete Eigenschaften

Die im Folgenden angegebenen Polynom-Approximationen gelten im Wesentlichen für die Lagrange'sche Simulation mit einem Phasenübergang der dispersen Phase. Für Vergleichsrechnungen mit Feststoffpartikeln gelten für das Trägergas Umgebungsbedingungen für den Druck p , die Temperatur T sowie die Dichte ρ ,

$$p = p_\infty = p_{\text{norm}} = 101325 \text{ Pa} \quad (9.1)$$

$$T = T_\infty = T_{\text{norm}} = 293,15 \text{ K} \quad (9.2)$$

$$\rho = \rho_\infty = \rho_{\text{norm}} = 1,15 \text{ kg/m}^3. \quad (9.3)$$

Im Einzelnen kann es nützlich sein, die Molmasse X_α einer Komponente α (mit dem Molekulargewicht \mathcal{M}_α) einer Mischung in die Massenanteile Y_α aus N_β reinen Stoffen umzurechnen:

$$Y_\alpha = \frac{X_\alpha \mathcal{M}_\alpha}{\sum_{\beta=1}^{N_\beta} X_\beta \mathcal{M}_\beta} \quad (9.4)$$

$$X_\alpha = \frac{Y_\alpha / \mathcal{M}_\alpha}{\sum_{\beta=1}^{N_\beta} Y_\beta / \mathcal{M}_\beta} \quad (9.5)$$

Des Weiteren schreibt sich für die nächsten Abschnitte $T_r = T/T_{\text{krit.}}$.

In Tabelle 9.1 sind die Stoffkonstanten und die als konstant verwendeten Eigenschaften der Stoffe Luft, Isopropanol und Dekan zusammengestellt. ω bezeichnet hier den azentrischen Faktor eines Stoffes. Die allgemeine Gaskonstante \overline{R} beträgt

$$\overline{R} = 8314,41 \text{ J/(kmol K)}. \quad (9.6)$$

Tabelle 9.1: Stoffkonstanten und ausgewählte, als konstant verwendete Eigenschaften

	Luft	Isopropanol	Dekan
\mathcal{M}_v [kg/kmol]	28,97	60,09	142
$T_{\text{boil.}}$ [K]	78,67	355,15	447,7
$T_{\text{krit.}}$ [K]	132,45	508,3	617,6
$p_{\text{krit.}}$ [Pa]	37,7	48,2	20,96
ω [-]	0	0,665	0,491
$\rho(T_{\text{norm}})$ [kg/m ³]	1.15	786	642
$\Delta h_{v0}(T_{\text{boil.}})$ [kJ/kg]	-	666	277
$p_{\text{sat.}}(T_{\text{boil.}})$ [Pa]	1	1	1

9.2 Stoffeigenschaften der Flüssigkeitsphase

In den folgenden Abschnitten werden die zur Bestimmung der Stoffeigenschaften von Isopropanol und von Dekan verwendeten Polynom-Approximationen dargestellt. Falls nichts anderes gesagt wird, bezieht sich die Formulierung auf beide Stoffe.

9.2.1 Dichte

Die Bestimmung der Dichte basiert auf der Empfehlung von Yamada & Gunn (in Reid et al. [147]),

$$\frac{1}{\rho_d} = V^R Z_{cr}^{\phi(T_r, T_r^R)}. \quad (9.7)$$

Z_{cr} und $\phi(T_r, T_r^R)$ bestimmen sich zu

$$Z_{cr} = 0,29056 - 0,08775 \omega \quad (9.8a)$$

bzw.

$$\phi(T_r, T_r^R) = (1 - T_r)^{2/7} - (1 - T_r^R)^{2/7}. \quad (9.9a)$$

V^R ist das molare Volumen der (reduzierten) Temperatur T_r^R , welche zu $T_r^R = 293,15$ K gesetzt wird. Die zur Beschreibung der Tropfengrößenabnahme benötigte Größe $d\rho_d/dT_d$ ergibt sich aus Gl. (9.7) zu

$$d\rho_d/dT_d = \rho_d \frac{(2/7)}{T_{\text{krit.}}} (1 - T_r)^{-5/7} \ln(Z_{cr}). \quad (9.10)$$

9.2.2 Spezifische Wärmekapazität

Zur Bestimmung der spezifischen Wärmekapazität wird auf die Methode von Rowlinson und Bondi (Reid et al. [147]) zurückgegriffen, die für c folgende Gleichung geben:

$$c = \bar{c}_{p,v} + \frac{\bar{R}}{\mathcal{M}_v} \left[1,45 + \frac{0,45}{1 - T_r} + 0,25 \omega \left(17,11 + \frac{25,2 (1 - T_r)^{1/3}}{T_r} + \frac{1,742}{1 - T_r} \right) \right] \quad (9.11)$$

$\bar{c}_{p,v}$ ist hierbei nach Gl. (9.16) gegeben.

9.3 Stoffeigenschaften beim Phasenübergang - Dampfdruck und spezifische Verdampfungsenthalpie

Der Dampfdruck zur Temperatur T bestimmt sich aus der Clausius-Clapeyron Beziehung

$$\ln \frac{p_{\text{sat.}}(T)}{p_{\text{sat.}}(T_{\text{boil.}})} = \frac{\mathcal{M}_v \Delta h_v(T)}{\bar{R}} \left(\frac{1}{T_{\text{boil.}}} - \frac{1}{T} \right), \quad (9.12)$$

wobei sich die spezifische Verdampfungsenthalpie ergibt zu

$$\Delta h_v(T) = \Delta h_{v0}(T_{\text{boil.}}) \left(\frac{1 - T/T_{\text{krit.}}}{1 - T_{\text{boil.}}/T_{\text{krit.}}} \right)^{0.38}. \quad (9.13)$$

$T_{\text{boil.}}$ und $\Delta h_{v0}(T_{\text{boil.}})$ sind in Tabelle 9.1 gegeben.

9.4 Stoffeigenschaften der Gasphase

Die im Folgenden angegebenen Mischungsregeln werden in der Verdampfungsmodellierung gebraucht, um die Stoffeigenschaften des Luft-Dampf-Gemisches im Film zu berechnen. Sofern nichts anderes gesagt wird, ist für die Temperatur $T \rightarrow T_{\text{ref.}}$ nach der in Kapitel 4.2.3.1 beschrieben 1/3-Regel einzusetzen. Des Weiteren bezieht sich die Formulierung auf beide Stoffe, insofern die Stoffe (Luft, Dekan oder Isopropanol) nicht explizit genannt werden.

9.4.1 Dichte

Reine Stoffe

Bei Umgebungsdruck kann das Gas als ideal betrachtet werden:

$$\bar{\rho}_v = \frac{p_{\text{norm}} \mathcal{M}_v}{\bar{R} T}, \quad \text{bzw.} \quad \bar{\rho}_a = \frac{p_{\text{norm}} \mathcal{M}_a}{\bar{R} T} \quad (9.14)$$

Gemische

Hat der reine Stoff β bei einer Temperatur T die Dichte $\bar{\rho}_\beta$, so hat das ideale Gemisch aus N_β reinen Stoffen (wobei der Stoff β im Gemisch den Massenanteil Y_β habe) bei konstantem Druck p_{norm} die Dichte $\bar{\rho}_m$:

$$\bar{\rho}_m = \frac{1}{\sum_{\beta=1}^{N_\beta} Y_\beta / \bar{\rho}_\beta} \quad (9.15)$$

9.4.2 Spezifische Wärmekapazität

Reine Stoffe

Die spezifische Wärmekapazität [kJ/(kg K)] von Isopropanol-Dampf bestimmt sich aus der Annahme, dass sich dieser wie ein ideales Gas verhält:

$$\bar{c}_{p,v} = \frac{4.1868}{\mathcal{M}_v} \left[\sum_{i=1}^N n_i A_i + \sum_{i=1}^N n_i B_i T + \sum_{i=1}^N n_i C_i T^2 + \sum_{i=1}^N n_i D_i T^3 \right] \quad (9.16)$$

Hier sind A_i , B_i , C_i und D_i Zahlenwerte für spezielle Strukturelemente (Gruppen), die für Isopropanol in Tabelle 9.2 gegeben sind. n_i ist die Anzahl der Strukturelemente i in dem be-

Tabelle 9.2: Konstanten für CH_3 , CH und OH

	A_i	B_i	C_i	D_i
CH_3	0,6087	2,1433	-0,0852	0,1135
CH	-3,5232	3,4158	-0,2816	0,8015
OH	6,5128	-0,1347	0,0414	-0,1623

trachteten Molekül. Für Isopropanol-Alkohol ergibt sich $[(CH_3)_2 CH OH]$.

Für Dekan geben Abramzon & Sirignano [1] folgenden Fit für $\bar{c}_{p,v}$ [J/(kg K)]:

$$\bar{c}_{p,v} = 106,6 + 5765 T^* - 1675 (T^*)^2 + 473,1 (T^*)^3, \quad \text{für } T^* \leq 0,8, \quad (9.17)$$

$$\bar{c}_{p,v} = 411,1 + 5460 T^* - 2483 (T^*)^2 + 422,9 (T^*)^3, \quad \text{für } T^* > 0,8. \quad (9.18)$$

Die bezogene Temperatur ist $T^* = T/1000$.

Die spezifische Wärmekapazität von Luft (Subskript a) ergibt sich nach Daubert et al. [29] zu

$$\bar{c}_{p,a} = \frac{1}{\mathcal{M}_a} \left[A + B \left(\frac{C/T}{\sinh(C/T)} \right)^2 + D \left(\frac{E/T}{\cosh(E/T)} \right)^2 \right]. \quad (9.19)$$

Tabelle 9.3: Parameter für Luft

	A	B	C	D	E
Luft	$2,8958 \cdot 10^4$	$9,39 \cdot 10^3$	$3,012 \cdot 10^3$	$7,58 \cdot 10^3$	$1,484 \cdot 10^3$

Gemische

Für ein ideales Gas ist die spezifische Wärmekapazität $\bar{c}_{p,m}$ eines aus N_β reinen Stoffen mit den spezifischen Wärmekapazitäten $\bar{c}_{p,\beta}$ und den Massenanteilen Y_β

$$\bar{c}_{p,m} = \sum_{\beta=1}^{N_\beta} Y_\beta \bar{c}_{p,\beta} \quad (9.20)$$

9.4.3 Thermische Wärmeleitfähigkeit

Reine Stoffe

Für Isopropanol ergibt sich die Wärmeleitfähigkeit [$10^6 \cdot \text{W}/(\text{m K})$] zu

$$\bar{\lambda}_v = \frac{\bar{\mu}_v}{\mathcal{M}_v} \left[1,3(\bar{c}_{p,v} \mathcal{M}_v - \bar{R}) + 1,843 \bar{R} - 1,256 c_2 - \frac{0,347 \bar{R}}{T_r} - 3 c_1 \right], \quad (9.21)$$

mit $c_1 = 1,0067$, $c_2 = 4,38$.

Für Dekan geben Abramzon & Sirignano [1] folgenden Fit für $\bar{\lambda}_v$ [$10^3 \cdot \text{W}/(\text{m K})$]:

$$\bar{\lambda}_v = 1,214 \cdot 10^{-2} (T/300)^{1,8} \quad (9.22)$$

Die thermische Wärmeleitfähigkeit [$10^3 \cdot \text{W}/(\text{m K})$] von Luft ergibt sich aus

$$\bar{\lambda}_a = \lambda_a(373 \text{ K}) (T/373)^{1,8}, \quad (9.23)$$

mit $\lambda_a(373 \text{ K}) = 0,03139$.

Gemische

Reid et al. [147] empfehlen für nichtpolare Gase die Methode von Wassiljewa mit der Modifikation von Mason und Saxena (zur Berechnung der Funktionen $A_{\gamma\beta}$) und von Roy und Thodos (zur Berechnung der Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{tr,\gamma}$ durch Translation),

$$\bar{\lambda}_m = \sum_{\beta=1}^{N_\beta} \frac{X_\beta \lambda_\beta}{\sum_{i=1}^{N_i} X_i A_{\beta i}}, \quad (9.24)$$

wobei

$$A_{\beta i} = \frac{\left[1 + \left(\frac{\lambda_{T_r, \beta}}{\lambda_{T_r, i}} \right)^{1/2} \cdot \left(\frac{\mathcal{M}_{\beta}}{\mathcal{M}_i} \right)^{1/4} \right]^{1/2}}{\left[8 \left(1 + \frac{\mathcal{M}_{\beta}}{\mathcal{M}_i} \right) \right]^{1/2}} \quad (9.25)$$

$$\frac{\lambda_{T_r, \beta}}{\lambda_{T_r, i}} = \frac{\Gamma_{\beta} [\exp(0,0464 T_{r, \beta}) - \exp(0,2412 T_{r, \beta})]}{\Gamma_i [\exp(0,0464 T_{r, i}) - \exp(0,2412 T_{r, i})]} \quad (9.26)$$

$$\Gamma_i = 210 \left[\frac{T_{\text{krit}, i} \mathcal{M}_i^3}{(p_{\text{krit}, i}/10^5)^4} \right]^{1/6} \quad (9.27)$$

9.4.4 Dynamische Viskosität

Reine Stoffe

Die Temperaturabhängigkeit der Viskosität von Isopropanol wird im VDI-Wärmeatlas, Blatt Da 25, wie folgt beschrieben:

$$\bar{\mu}_v = [(\mu \xi)^r f_p] \frac{1}{\xi} \quad (9.28)$$

Für $(\mu \xi)^r$ erhält man

$$(\mu \xi)^r = 0,807 T_r - 0,357 \exp(-0,449 T_r) + 0,34 \exp(-4,058 T_r) + 0,018. \quad (9.29)$$

Der Faktor ξ bestimmt sich aus:

$$\xi = \frac{[T_{\text{krit}}/\text{K}]^{1/6} [\bar{R}/(\text{J/kmol K})]^{1/6} [N_A/(1/\text{kmol})]^{1/3}}{[\mathcal{M}_v/(\text{kg/kmol})]^{1/2} [p_{\text{krit}}/(\text{N/m}^2)]^{2/3}} \quad (9.30)$$

Die Konstante f_p ist für Isopropanol $f_p = 1,141824$. Die Avogadro-Konstante ist $N_A = 6.022 \cdot 10^{26}$.

Für Dekan geben Abramzon & Sirignano [1] folgenden Fit für $\bar{\mu}_v$ [kg/(m s)]:

$$\bar{\mu}_v = 5,64 \cdot 10^{-6} + 1,75 \cdot 10^{-8} (T - 300) \quad (9.31)$$

Für Luft gibt Daubert et al. [29] folgenden Fit für μ_a [kg/(m s)]:

$$\bar{\mu}_a = \frac{1,425 \cdot 10^{-6} \cdot T^{5,039 \cdot 10^{-1}}}{1 + 1,083 \cdot 10^2 T^{-1}} \quad (9.32)$$

Gemische

Reid et al. [147] empfehlen für Gemische aus Komponenten mit stark unterschiedlichen Molekulargewichten die Methode von Reichenberg. Die umfangreichen Formeln werden im Folgenden

für den in der vorliegenden Arbeit benötigten Fall einer binären Mischung mit der Molenzusammensetzung X_a , X_v zusammengestellt:

$$\bar{\mu}_m = K_a (1 + H_{a,v}^2 K_v^2) + K_v (1 + 2 H_{a,v} K_1 + H_{a,v}^2 K_a^2), \quad (9.33)$$

wobei

$$K_a = \frac{X_a \bar{\mu}_a}{X_a + \bar{\mu}_a X_v H_{a,v} (3 + 2 \mathcal{M}_v / \mathcal{M}_a)} \quad (9.34)$$

$$K_v = \frac{X_v \bar{\mu}_v}{X_v + \bar{\mu}_{d,v} X_a H_{a,v} (3 + 2 \mathcal{M}_a / \mathcal{M}_v)} \quad (9.35)$$

$$H_{a,v} = \frac{(\mathcal{M}_a \mathcal{M}_v / 32)^{1/2} [1 + 0.36 T_{r,av} (T_{r,av} - 1)]^{1/6}}{(\mathcal{M}_a + \mathcal{M}_v)^{3/2} T_{r,av}^{1/2}} (c_a + c_v)^2 \quad (9.36)$$

$$T_{r,av} = \frac{T}{(T_{\text{krit},1} T_{\text{krit},2})^{1/2}} \quad (9.37)$$

$$c_i = \frac{\mathcal{M}_i^{1/4}}{(\mu_i d_i)^{1/2}} \quad (9.38)$$

$$d_i = \frac{[1 + 0.36 T_{r,i} (T_{r,i} - 1)]^{1/6}}{T_{r,i}^{1/2}}. \quad (9.39)$$

9.4.5 Binärer Diffusionskoeffizient

Der Diffusionskoeffizient $[\text{m}^2/\text{s}]$ für die Mischung Luft/Isopropanol ist von Vargaftik (1983) für verschiedene Temperaturen gemessen worden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde folgende Korrelation verwendet:

$$\bar{D}_m = 4,75 \cdot 10^{10} T^{1,75} \quad (9.40)$$

Für Dekan wird der Empfehlung von Reid et al. [147] gefolgt, die zur Berechnung des Diffusionskoeffizienten die Methode von Fuller et al. vorschlagen:

$$\bar{D}_m = \frac{1,43 \cdot 10^{-7} T^{1,75}}{\sqrt{2} (1/\mathcal{M}_a + 1/\mathcal{M}_v)^{-1/2} (p_{\text{norm}}/10^5) [(\sum V)_a^{1/3} + (\sum V)_v^{1/3}]^2} \quad (9.41)$$

$(\sum V)$ ist das sogenannte Diffusionsvolumen. Es wird durch die Summation der einzelnen atomaren Diffusionsvolumina berechnet. Für Luft und Dekan ergibt sich $(\sum V)_a = 19,7$, bzw. $(\sum V)_v = 209,8$.

Literaturverzeichnis

- [1] B. ABRAMZON UND W. A. SIRIGNANO, *Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations*, Int. J. Heat Mass Transfer, 32 (1989), S. 1605–1618.
- [2] S. K. AGGARWAL, A. Y. TONG UND W. A. SIRIGNANO, *A Comparison of Vaporization Models in Spray Calculations*, AIAA J., 22 (1984), S. 1448–1457.
- [3] S. K. AGGARWAL UND Y. XIAO, *Effect of external Forcing on Droplet Dispersion in a developing Shear Layer*, J. Propulsion and Power, 10 (1994), S. 395–401.
- [4] R. ANDERSON UND C. MENEVEAU, *Effects of the Similarity Model in Finite-Difference LES of isotropic Turbulence using a Lagrangian Dynamic Mixed Model*, Flow, Turbulence and Combustion, 62 (1999), S. 201–225.
- [5] J. BARDINA, J. H. FERZIGER UND W. C. REYNOLDS, *Improved Subgrid Model for Large Eddy Simulation*, AIAA Pap. 80-1357, (1980).
- [6] A. B. BASSET, *Treatise on Hydrodynamics*, Vol: 1+2, Originalpublikationen: Deighton, Bell und Co, London (1888), republished by Dover Publications, Cambridge, (1961).
- [7] J. BELLAN, *Perspectives on Large Eddy Simulations for Sprays: Issues and Solutions*, Atomization and Sprays, 10 (2000), S. 409–425.
- [8] A. BERLEMONT, P. DESJONQUERES UND G. GOUESBET, *Particle Lagrangian Simulation in turbulent Flows*, Int. J. Multiphase Flow, 16 (1990), S. 19–34.
- [9] M. BOIVIN, O. SIMONIN UND K. D. SQUIRES, *Direct Numerical Simulation of Turbulence Modulation by Particles in isotropic Turbulence*, J. Fluid Mech., 375 (1998), S. 235–263.
- [10] ———, *On the Prediction of Gas-Solid Flows with Two-Way Coupling using Large Eddy Simulation*, Physics of Fluids, 12 (2000), S. 2080–2090.
- [11] M. J. BOUSSINESQ, *Theorié Analytique de la Chaleur*, Gauthier-Villars, Paris, 2 (1903).
- [12] I. N. BRONSTEIN UND K. A. SEMENDJAJEW, *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 24. Aufl., 1979.

- [13] BUENOS AIRES, *Weltenergiekonferenz*, 2001.
- [14] M. BURGER, G. KLOSE, G. ROTTENKOLBER, R. SCHMEHL, D. GIEBERT, O. SCHÄFER, R. KOCH UND S. WITTIG, *A combined Eulerian and Lagrangian Method for Prediction of evaporating Sprays*, J. of Engineering for Gas Turbines and Power, 124 (2002), S. 481–488.
- [15] CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, *Numerical Recipes in FORTRAN, 2nd Edition*, 1986.
- [16] C. P. CHEN UND P. E. WOOD, *A Turbulence Closure Model for dilute Gas-Particle Flows*, Can. J. Chem. Engineering, 63 (1985), S. 349–360.
- [17] X. Q. CHEN UND J. C. F. PEREIRA, *Computation of Particle-laden turbulent Gas Flows using Two Dispersion Models*, AIAA Journals, 36 (1998), S. 539–546.
- [18] M. CHRIGUI, G. AHMADI UND A. SADIKI, *Study of Interaction in Spray between evaporating Droplets and Turbulence using Second-Order Turbulence Models and a Lagrangian Approach*, Progress in Computational Fluid Dynamics, (2003).
- [19] M. K. CHUNG, H. J. SUNG UND K. B. LEE, *Computational Study of turbulent Gas-Particle Flow in a Venturi*, J. Fluids Engr., 108 (1986), S. 248–253.
- [20] R. C. CLIFT, R. GRACE, J UND M. E. WEBER, *Bubbles, Drops and Particles*, Kluwer Academic, 1978.
- [21] G. COMPTE-BELLOT UND S. CORRISIN, *The Use of a Contraction to improve the Isotropy of Grid-generated Turbulence*, J. Fluid Mech., 25 (1966), S. 657–682.
- [22] C. T. CROWE, Hrsg., *The State-of-the-Art in the Development of Numerical Models for Dispersed Phase Flows*, Tsukuba, 1991. Proc. of the Int. Conf. on Multiphase Flow.
- [23] ———, Hrsg., *Modeling Turbulence in Multiphase Flows*, 1993. Proc. 2nd. Int. Symp. on Engng. Turbulence Modeling and Experiments.
- [24] ———, *On Models for Turbulence Modulation in Fluid-particle Flows*, Int. J. Multiphase Flow, 26 (2000), S. 719–727.
- [25] ———, *A Review of Carrier-Phase Turbulence in dispersed Flows*, Proc. of the 4th Int. Conf. on Multiphase Flow, (2001). Paper-No. 604.
- [26] C. T. CROWE, M. P. SHARMA UND D. E. STOCK, *The Particle-Source-in-Cell (PCI-Cell) Method for Gas-Droplet Flows*, J. of Fluids Engineering, 6 (1977), S. 325–332.
- [27] C. T. CROWE, M. SOMMERFELD UND Y. TSUJI, *Multiphase Flows with Droplets and Particles*, CRC Press LCC, Boca Raton, Boston, New York, Washington, London, 1998.

- [28] G. T. CSANADY, *Turbulent Diffusion of heavy Particles in the Atmosphere*, J. Atmos. Sci., 20 (1963), S. 201 ff.
- [29] T. E. DAUBERT, R. P. DANNER, H. M. SIBUL UND C. C. STEBBINS, *Physical and Thermodynamic Properties of pure Chemicals. Data Compilation*, Taylor & Francis, 1997.
- [30] J. W. DEARDOFF, *A numerical Study of three-dimensional turbulent Channel Flow at large Reynolds Numbers*, J. Fluid Mech., 41 (1970), S. 453–480.
- [31] E. DEUTSCH UND O. SIMONIN, *Large Eddy Simulation applied to the Modelling of particulate transport Coefficients in turbulent Two-Phase Flows*, in: 8th Symp. on Turbulent Shear Flows, 1991, S. 10 ff.
- [32] ———, *Large Eddy Simulation applied to the Motion of Particles in stationary homogeneous Fluid Turbulence*, ASME-FED, Turbulence Modification in Multiphase FLOws, 110 (1991), S. 35–42.
- [33] J. DING, R. W. LYCZKOWSKI, W. T. SHA, S. A. ALTABELLI UND E. FUKUSHIMA, *Numerical Analysis of Liquid-Solids Suspension Velocities and Concentrations obtained by NMR Imaging*, Powder Tech., 77 (1993), S. 301–312.
- [34] D. A. DREW, *Averaged Field Equations for Two-Phase Media*, Stud. Appl. Math., L, (1971), S. 133–165.
- [35] F. DURST, D. MILOJEVIC UND B. SCHÖNUNG, *Eulerian and Langrangian Predictions of particulate Two-Phase Flows: A numerical Study*, Appl. Math. Modelling, 8 (1984), S. 101–115.
- [36] ———, *Large Eddy Simulation applied to the Motion of Particles in stationary homogeneous Fluid Turbulence*, Turbulence Modification in Multiphase Flows, ASME FED, 110 (1991), S. 35–42.
- [37] M. DÜSING, *Grobstruktursimulation turbulenter Vormischflammen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2003.
- [38] J. K. EATON UND J. R. FESSLER, *Preferential Concentration of heavy Particles by Turbulence*, Int J. Multiphase Flow, 20 (1994), S. 169 ff.
- [39] S. ELGHOBASHI, *On Predicting Particle-laden turbulent FLOws*, Appl. Sci. Res., 52 (1994), S. 309–329.
- [40] S. ELGHOBASHI UND T. W. ABOU-ARAB, *A Two Equation Model for Two-Phase Flow*, Phys. of Fluids, 26 (1983), S. 931–938.

- [41] S. ELGHOBASHI, T. W. ABOU-ARAB, M. RIZK UND A. MOSTAFA, *Prediction of the Particle-laden Jet with a Two Equation Turbulence Model*, Int J. Multiphase Flow, (1984), S. 697–710.
- [42] S. ELGHOBASHI UND G. C. TRUESDELL, *Direct Numerical Simulation of Particle Dispersion in a decaying isotropic Turbulence*, J. Fluid Mech., 242 (1992), S. 655–700.
- [43] ———, *On the Twoway Interaction between homogenous Turbulence and dispersed solid Particles I: Turbulence Modification*, Phys. of Fluids A, 5 (1993), S. 1790–1796.
- [44] G. M. FAETH, *Evaporation and Combustion of Sprays*, Progress in Energy and Combustion Science, 9 (1983), S. pp. 1.
- [45] ———, *Mixing, Transport and Combustion in Sprays*, Progress in Energy and Combustion Science, 13 (1987), S. 293–345.
- [46] J. R. FESSLER, J. D. KULICK UND J. K. EATON, *Preferential Concentration of heavy Particles in a turbulent Channel Flow*, Phys. of Fluids, 6 (1994), S. 3742 ff.
- [47] H. FORKEL, *Über die Grobstruktursimulation turbulenter Wasserstoff-Diffusionsflammen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 1999.
- [48] T. FRANK, *Parallele Algorithmen für die numerische Simulation dreidimensionaler, disperser Mehrphasenströmungen und deren Anwendung in der Verfahrenstechnik*, Shaker Verlag, Aachen, 2002.
- [49] F. N. FRENKIEL, *On the Kinematics of Turbulence*, J. Aeronautical Sciences, (1948), S. 57–64.
- [50] R. FRIEDRICH, *Grobstruktursimulation turbulenter Strömungen*. Kurzlehrgang Turbulenz, Lehrstuhl für Fluidmechanik, Technische Universität München.
- [51] N. FRÖSSLING, *Über die Verdunstung fallender Tropfen*, Gerlands Beiträge zur Geophysik, 52 (1938), S. 170–216.
- [52] J. GARCIA, *Study of the Turbulence Modulation in Particle-laden Flows using LES*, Bericht, Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, Stanford, 2001.
- [53] S. GEISS, *Über die Turbulenzmodulation turbulenter, Partikel-beladener, nicht-reagierender Zweiphasenströmungen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2001.
- [54] S. GEISS, Z. STOJANOVIC, M. CHRIGUI, A. SADIKI, A. DREIZLER, M. SCHÄFER UND J. JANICKA, *Investigation of Turbulence Modification in a non-reactive Two-phase Flow*, Exp. in Fluids, 36 (2004), S. 344–354.

- [55] S. GEISS, Z. STOJANOVIC, A. SADIKI, A. MALTSEV, A. DREIZLER UND J. JANICKA, *Measurements and numerical Prediction of Flow and Particle Fields in turbulent Particle-laden Flows - Turbulence Modulation*, in: 2nd Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Bd. 2, Stockholm, 2001, S. 347–352.
- [56] M. GERMANO, *Turbulence: The Filtering Approach*, J. Fluid Mech., 238 (1992), S. 325 ff.
- [57] M. GERMANO, U. PIOMELLI, P. MOIN UND W. H. CABOT, *A dynamic Subgrid-Scale Eddy Viscosity Model*, Phys. Fluids A, 3 (1991), S. 1760–1765.
- [58] R. A. GORE UND C. T. CROWE, *Effect of Particle Size on Modulating turbulent Intensity*, Int. J. of Multiphase Flow, 15 (1989), S. 279–285.
- [59] ———, *Modulation of Turbulence by a dispersed Phase*, J. of Fluids Engineering, 113 (1991), S. 304–307.
- [60] A. GOSMAN UND E. IOANNIDES, *Aspects of Computer Simulation of Liquid-fueled Combustors*, J. of Energy, 7 (1983), S. 482–490.
- [61] C. GOURDEL, O. SIMONIN UND E. BRUNIER, *Modelling and Simulation of Gas-Solid turbulent Flows with a binary Mixture of Particles*, in: Third International Conf. on Multiphase Flow, Lyon, 1998.
- [62] D. I. GRAHAM UND P. W. JAMES, *Turbulent Dispersion of Particles using Eddy Interaction Models*, Int. J. of Multiphase Flow, 22 (1996), S. 157–175.
- [63] G. R. GRIMMET UND D. R. STIRZAKER, *Probability and random Processes*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 2nd Aufl., 1992.
- [64] B. GROH, M. CHRIGUI, Z. STOJANOVIC, A. SADIKI, A. DREIZLER UND J. JANICKA, *Validation of Second-Order Moment Turbulence Models using Large Eddy Simulation and Experiments for turbulent Two-Phase Flows*, in: 3rd Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Bd. 1, Sendai, Japan, 2003, S. 197–202.
- [65] C. D. HALL, *The Simulation of Particle Motion in the Atmosphere by a numerical Random-Walk Model*, Quart. J. R. Met. Soc., 101 (1975), S. 235–244.
- [66] D. HANSELL, I. M. KENNEDY UND W. KOLLMANN, *A Simulation of Particle Dispersion in a turbulent Jet*, Int. J. Multiphase Flow, 18 (1992), S. pp. 559.
- [67] F. E. HARLOW UND J. E. WELCH, *Numerical Calculations of time-dependent viscous incompressible Flow of Fluid with free Surface*, Phys. Fluids, 8 (1965), S. 2182.
- [68] C. HÄRTEL, L. KLEISER, F. UNGER UND R. FRIEDRICH, *Subgrid-Scale Energy Transfer in the near Wall Region of turbulent Flows*, Phys. Fluids, 6 (1994), S. 3130–3143.

- [69] G. HETSRONI, *Particle-Turbulence Interaction*, Int. J. Multiphase Flow, 15 (1989), S. 735–746.
- [70] J. O. HINZE, *Turbulence*, New York: McGraw-Hill, 1975.
- [71] G. L. HUBBARD, V. E. DENNY UND A. F. MILLS, *Droplet Vaporization: Effects of transient and variable Properties*, Int. J. Heat Mass Transfer, 18 (1975), S. 1003–1008.
- [72] W. P. JONES UND P. MUSONGE, *Closure of the Reynolds stress and Scalar Flux Equations*, Phys. Fluids, 31 (1988), S. 3589–3604.
- [73] T. KAJISHIMA UND S. TAKIGUCHI, *Interaction of Particles Clusters and Fluid Turbulence*, Int. J. Heat and Fluid Flow, 23 (2002), S. 639–646.
- [74] T. KAJISHIMA, S. TAKIGUCHI UND Y. MIYAKE, *Modulation and Subgrid-Scale Modeling of Gas-Particle turbulent Flow*, Recent Advances in DNS and LES (Eds. Knight, D. and Sakell, L.), Kluwer Academic, 1999.
- [75] A. KEMPF, *Grobstruktursimulation turbulenter Diffusionsflammen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2003.
- [76] I. KIM, S. ELGHOBASHI UND W. A. SIRIGNANO, *On the Equation for Spherical-Particle Motion: Effect of Reynolds and Acceleration Numbers*, J. Fluid Mech., 367 (1998), S. 221–253.
- [77] W. KIM UND S. MENON, *A new dynamic One-Equation Subgrid-Scale Model for Large Eddy Simulation*, AIAA 95-0356, (1995). 33rd Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, January 9–12 / Reno, NV.
- [78] A. KITAGAWA, Y. MURAI UND F. YAMAMOTO, *Two-Way Coupling of a Eulerian-Lagrangian Model for disperse Multiphase Flows using filtering Functions*, Int. J. Multiphase Flow, 27 (2001), S. 2129–2153.
- [79] M. KLEIN, *Direkte Numerische Simulation des primären Strahlzerfalls in Einstoff-zerstäuberdüsen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2002.
- [80] ———, *An Attempt to access the Quality of Large Eddy Simulation in the Context of implicit Filtering*, in: Second International Workshop on Trends in numerical and Physical Modeling of turbulent Process in Gas Turbine Combustors and automotive Engines, Heidelberg, Deutschland, 2004, S. 51–59.
- [81] M. KLEIN, A. SADIKI UND J. JANICKA, *A digital Filter based Generation of Inflow Data for spatially developing Direct Numerical or Large Eddy Simulation*, J. Comp. Physics, 186 (2003), S. 652–665.

- [82] G. KOHNEN, *Über den Einfluss der Phasenwechselwirkungen bei turbulenten Zweiphasenströmungen und deren numerische Erfassung in der Euler-Lagrange Betrachtungsweise*, Dissertation, Institut für mechanische Verfahrenstechnik und Umweltschutztechnik, Martin Luther Universität Halle-Wittenberg, 1997.
- [83] G. KOHNEN, M. RÜGER UND M. SOMMERFELD, *Convergence Behaviour for Numerical Calculations by the Euler/Lagrange Method for strongly coupled Phases*, Numerical Methods in Multiphase Flows, ASME FED, 185 (1994), S. 191–202.
- [84] A. KOLMOGOROV, *The Equations of turbulent Motion in an incompressible Fluid*, Izvestia Acad. Sci., USSR, Phys., 6 (1942), S. 56–58.
- [85] R. H. KRAICHNAN, *Diffusion by a Random Velocity Field*, Phys. Fluids, 13 (1970), S. 22–31.
- [86] S. KRAJNOVIC UND D. L., *Large Eddy Simulation of the Flow around a surface-mounted Cube using a dynamic One-Equation Subgrid Model*, in: First International Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Santa-Barbara, 1999, S. 741–746.
- [87] J. D. KULICK, J. R. FESSLER UND J. K. EATON, *Particle Response and Turbulence Modification in fully developed Channel Flow*, J. Fluid Mech., 277 (1994), S. 109–134.
- [88] B. E. LAUNDER, G. C. REECE UND W. RODI, *Progress in the Development of a Reynolds-stress Turbulence Closure*, J. Fluid Mech., 68 (1975), S. 537–566.
- [89] J. LAVIÉVILLE, E. DEUTSCH UND O. SIMONIN, *Large Eddy Simulation of Interactions between colliding Particles and a homogeneous isotropic Turbulence Field*, Gas Solid Flows, ASME FED, 228 (1995), S. 347–353.
- [90] J. LAVIÉVILLE, O. SIMONIN, A. BERLEMONT UND Z. CHANG, *Validation of inter-particle Collision Models based on Large Eddy Simulation in Gas-Solid turbulent homogeneous Shear Flow*, Fluids Engineering Division Summer Meeting, ASME FED, (1997), S. 1–9.
- [91] C. K. LAW, *Unsteady Droplet Vaporization with Droplet Heating*, Combustion and Flame, 20 (1976), S. 17–22.
- [92] ———, *Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion*, Prog. Energy Combustion Sci., 8 (1982), S. 171–201.
- [93] C. K. LAW UND A. SIRIGNANO, W., *Unsteady Droplet Combustion with Droplet Heating II, Conduction Limit*, Combustion and Flame, 29 (1977), S. 175–186.
- [94] S. LEE, S. K. LELE UND P. MOIN, *Simulation of spatially evolving Turbulence and the Applicability of Taylor's Hypothesis in compressible Flow*, Phys. Fluids A, 4 (1992), S. 1521–1530.

- [95] B. J. LEGG, *Movement of plant Pathogens in the crop Canopy*, Phil. Trans. R. Soc. London, B, 302 (1983), S. 559–574.
- [96] B. J. LEGG UND M. R. RAUPACH, *Markov-chain Simulations of Particle Dispersion in inhomogeneous Flows: The mean drift Velocity induced by a Gradient in Eulerian Velocity Variance.*, Boundary-Layer Meteorology, 24 (1982), S. 3–13.
- [97] K. LEI, N. TANIGUCHI UND T. KOBAYASHI, *Full-Way Coupling of Large Eddy Simulation for Particle-laden turbulent Flows using new dynamic SGS-Models*, in: Second International Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Bd. 2, Stockholm, 2001, S. 111–116.
- [98] ———, *A New Dynamic SGS-Model for Large Eddy Simulation of Particle-laden Flows*, in: Third AFOSR Int. Conference on DNS/ LES (TAICDL), 2001.
- [99] A. LEONARD, *Energy Cascade in Large Eddy Simulations of Turbulent Fluid Flows*, Advances in Geophysics, 18 (1974), S. 237–248.
- [100] M. LESIEUR UND O. MÉTAIS, *New Trends in Large-Eddy Simulations of Turbulence*, Annu. Rev. Fluid. Mech., 28 (1996), S. 45–82.
- [101] L. M. LILJEGREN, *The Effect of a Mean Fluid Velocity Gradient on streamwise Velocity Variance of a Particle suspended in a turbulent Flow*, Int. J. Multiphase Flow, 19 (1993), S. 471 ff.
- [102] D. K. LILLY, *The Representation of Small-Scale Turbulence in numerical simulation on Experiments*, Proceedings of the IBM Scientific Computing Symp. on Environmental Sciences, 320 (1967), S. 195–210.
- [103] ———, *A proposed Modification of the Germano Subgrid-Scale Closure Method*, Phys. Fluids A, 4 (1992), S. 633–635.
- [104] F. C. LOCKWOOD, A. P. SALOOJA UND S. A. SYED, *A Prediction Method for coal-fired Furnaces*, Combust. Flame, 38 (1980), S. 1–15.
- [105] E. K. LONGMIRE UND E. J. K., *Structure of Particle-laden Round Jet*, J. Fluid Mech., 236 (1992), S. 217–257.
- [106] T. S. LUND, X. WU UND K. D. SQUIRES, *Generation of Turbulent Inflow Data for spatially developing Boundary Layer Simulations*, J. Comp. Phys., 140 (1998), S. 233–258.
- [107] K. MAHESH, G. CONSTANTINESCU, S. APTE, G. IACCARINO UND P. MOIN, *Large Eddy Simulation of Gas Turbine Combustors*, Bericht, Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, Stanford, 2001.

- [108] K. MAHESH, G. CONSTANTINESCU UND P. MOIN, *Large Eddy Simulation of Gas Turbine Combustors*, Bericht, Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, Stanford, 2000.
- [109] F. MASHAYEK, *Direct Numerical Simulation of evaporating Droplet Dispersion in forced Low-Mach-Number Turbulence*, Int. J. Heat Mass Transfer, 41 (1998), S. 2601–2617.
- [110] ———, *Droplet-Turbulence Interactions in Low-Mach-Number homogeneous Shear Two-Phase Flows*, J. Fluid Mech., 367 (1998), S. 163–203.
- [111] F. MASHAYEK, F. A. JABERI, R. S. MILLER UND P. GIVI, *Dispersion and Polydispersity of Droplets in stationary isotropic Turbulence*, Int. J. Multiphase Flow, 23 (1997), S. 337–355.
- [112] M. R. MAXEY, *The gravitational Settling of Aerosol Particles in homogeneous Turbulence and random Flow Field*, J. Fluid Mech., 175 (1987), S. 441–465.
- [113] M. R. MAXEY UND J. J. RILEY, *Equation of Motion for a small rigid Sphere in a Non-uniform Flow*, Phys. Fluids, 26 (1983), S. 883–889.
- [114] J. B. McLAUGHLIN, *Aerosol Particle Deposition in numerically simulated Channel Flow*, Phys. Fluids A, 1 (1989), S. 1211 ff.
- [115] C. MENEVEAU UND T. S. LUND, *The Dynamic Smagorinsky Model and scale dependent Coefficients in the viscous Range of Turbulence*, Phys. Fluids, 9 (1997), S. 3932 ff.
- [116] C. MENEVEAU, T. S. LUND UND W. CABOT, *A Lagrangian Dynamic Subgrid-Scale Model of Turbulence*, Sommer Program, Center for Turbulence Research, Stanford, (1994), S. 271 ff.
- [117] C. MENGLER, *Grobstruktursimulation der Strömungs- und Mischungsfelder komplexer, anwendungsnaher Konfigurationen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2001.
- [118] S. MENON, P. K. YEUNG UND W. W. KIM, *Effect of Subgrid Models on the computed interscale Energy Transfer in isotropic Turbulence*, AIAA 94-2387, (1994). 25th AIAA Fluid dynamics conference.
- [119] R. S. MILLER UND J. BELLAN, *Direct Numerical Simulation of a confined three-dimensional Gas-Mixing Layer with one evaporating Hydrocarbon-Droplet-laden Stream*, J. Fluid Mech., 384 (1999), S. 293–338.
- [120] ———, *Direct Numerical Simulation and Subgrid Analysis of a transitional Droplet-laden Mixing Layer*, Phys. Fluids, 12 (2000), S. 650–671.

- [121] R. S. MILLER, K. HARSTAD UND J. BELLAN, *Evaluation of Equilibrium and Non-Equilibrium Evaporation Models for many Gas-Liquid Flow Simulations*, Int. J. Multiphase Flow, 24 (1998), S. 1026–1055.
- [122] P. MOIN, *Progress in Large Eddy Simulation of turbulent Flows*, AIAA 97-0749, (1997). 35th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, January 6–10 / Reno, NV.
- [123] P. MOIN, K. SQUIRES, W. CABOT UND S. LEE, *A dynamic Subgrid-Scale Model for compressible Turbulence and Scalar Transport*, Phys. Fluids A, 3 (1991), S. 2746–2757.
- [124] S. A. MORSI UND A. J. ALEXANDER, *An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems*, J. Fluid Mech., 55 (1972), S. 193–208.
- [125] A. A. MOSTAFA UND H. C. MONGIA, *On the Modeling of turbulent evaporating Sprays: Eulerian versus Lagrangian Approach*, Int. J. Heat Mass Transfer, 30 (1987), S. 2583–2593.
- [126] A. MUSCHINSKI, *A similarity Theory of locally homogeneous and isotropic Turbulence generated by a Smagorinsky-type LES*, J. Fluid Mech., (1996), S. 239–260.
- [127] K. NADAOKA, Y. NIHEI UND H. YAGI, *Grid-averaged Lagrangian LES model for multiphase turbulent Flow*, Int. J. Multiphase Flow, 25 (1999), S. 1669–1643.
- [128] W. NERNST, *Theorie der Reaktionsgeschwindigkeiten in heterogenen Systemen*, Zeitschrift für physikalische Chemie, 47 (1904), S. 52–55.
- [129] M. OCHS, *Verdunstung monodisperser, frei-beweglicher Brennstoff-Tropfen in einer turbulenten Heissluftströmung*, Dissertation, Laboratorium für Thermodynamik in neuen Technologien, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 1999.
- [130] F. ODAR UND W. S. HAMILTON, *Forces on a Sphere accelerating in a viscous Fluid*, J. Fluid Mech., 18 (1964), S. 302–314.
- [131] A. ORMANCEY UND J. MARTINON, *Prediction of Particle Dispersion in turbulent Flows*, Physico Chemical Hydrodynamics, 5 (1984), S. 229–244.
- [132] C. W. OSEEN, *Über die Stokes'sche Formel und eine verwandte Aufgabe in der Hydrodynamik*, Arkiv för Mathematik, Astr. och Fysik, 6 (1910).
- [133] ———, *Über den Gültigkeitsbereich der Stokes'schen Formel*, Arkiv för Mathematik, Astr. och Fysik, 9 (1913).
- [134] S. PANNALA UND S. MENON, *Large Eddy Simulation of Two-Phase turbulent Flows*, AIAA 98-0163, (1998). 36th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, January 12–15 / Reno, NV.

- [135] S. V. PANTAKAR, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [136] Y. PAO, *Structure of turbulent Velocity and Scalar Fields at large Wavenumbers*, Phys. Fluids, 8 (1965), S. 1063–1075.
- [137] A. PICART, A. BERLEMONT UND G. GOUESBET, *Modelling and Predicting Turbulence Fields and the Dispersion of discrete Particles transported by turbulent Flows*, Int. J. Multiphase Flow, (1986), S. 237–261.
- [138] U. PIOMELLI, W. H. CABOT, P. MOIN UND S. LEE, *Subgrid-Scale Backscatter in turbulent and transitional Flows*, Phys. Fluids A, 3 (1991), S. 1766–1771.
- [139] U. PIOMELLI, J. H. FERZIGER UND P. MOIN, *New approximate Boundary Conditions for Large Eddy Simulations of wall-bounded Flows*, Phys. Fluids A, 1 (1989), S. 1061–1068.
- [140] L. M. PISMEN UND A. NIR, *On the Motion of suspended Particles in stationary homogeneous Turbulence*, J. Fluid Mech., 84 (1978), S. 193 ff.
- [141] T. POINSOT UND V. D., *Theoretical and numerical Combustion*, Edwards Inc., (2001).
- [142] J. POZORSKI, J. A. MINIER UND O. SIMONIN, *Analysis and new Propositions for the Crossing Trajectory Effect in Lagrangian turbulent Dispersion Models*, Gas Solid Flows, ASME FED, 166 (1993), S. 63–71.
- [143] W. F. RANZ UND W. R. MARSHALL, *Evaporation from Drops*, Chem. Engng. Prog., 48 (1952), S. 141–173.
- [144] M. RASHIDI, G. HETSRONI UND S. BANERJEE, *Particle-Turbulence Interaction in a Boundary Layer*, Int. J. Multiphase Flow, 16 (1990), S. 935 ff.
- [145] M. W. REEKS, *On a kinetic Equation for the Transport of Particles in turbulent Flows*, Phys. Fluids A, 3 (1991), S. 446–456.
- [146] REGIONALES RECHENZENTRUM FÜR NIEDERSACHSEN/UNIVERSITÄT HANNOVER, *FORTRAN 77 Sprachumfang*, 1995.
- [147] R. C. REID, J. M. PRAUSNITZ UND T. K. SHERWOOD, *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill Book Company, New York, St. Louis, San Francisco, 1977.
- [148] O. REYNOLDS, *On the dynamical Theory of incompressible viscous Fluids and the Determination of the Criterion*, Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A, (1895), S. 123–164.
- [149] J. D. RIED, *Markov-chain Simulations of vertical Dispersion in the neutral Surface Layer for Surface and elevated Releases*, Boundary-Layer Meteorology, 16 (1979), S. 3–22.

- [150] J. J. RILEY UND G. S. PATTERSON JR., *Diffusion Experiments with numerically integrated isotropic Turbulence*, Phys. Fluids, 17 (1974), S. 292–297.
- [151] M. A. RIZK UND S. ELGHOBASHI, *A Two-Equation Turbulence Model for dispersed dilute confined Two-Phase Flows*, Int J. Multiphase Flow, (1989), S. 119–133.
- [152] W. RODI, M. BREUER, M. A. LESCHZINER, G. SCHEUERER UND B. SCHÖNUNG, *Numerische Berechnung turbulenter Strömungen in Forschung und Praxis*, Institut für Hydromechanik, Universität Karlsruhe, 23.–25. September 1996. Unterlagen zum Kurzlehrgang.
- [153] W. RODI, J. H. FERZIGER, M. BREUER UND M. PORQUIÉ, *Status of Large Eddy Simulation: Results of a Workshop*, Journal of Fluids Engineering, 119 (1997), S. 248–262.
- [154] C. B. ROGERS UND J. K. EATON, *The Behavior of solid Particles in a vertical turbulent Boundary Layer in Air*, Int. J. Multiphase Flow, 16 (1990), S. 819 ff.
- [155] D. W. I. ROUSON UND J. K. EATON, *Direct Numerical Simulation of Particles interacting with a turbulent Channel Flow*, in: 7th Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow, 1994.
- [156] G. RUBIN, *Widerstands- und Auftriebsbeiwerte von ruhenden, kugelförmigen Partikeln in stationären, wandnahen, laminaren Grenzschichten*, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1977.
- [157] A. SADIKI UND G. AHMADI, *Modeling of chemically active multiphase turbulent Flows based on rational extended Thermodynamics*, in: Proc. of the 9th European Turbulence Conference (ETC 9), 2002, S. 529–532.
- [158] V. SANKARAN UND S. MENON, *LES of Spray Combustion in Compressible High Reynolds Number Swirling Flows*, in: Second International Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Stockholm, 2001.
- [159] ———, *LES of Spray Combustion in Swirling Flows*, Journal of Turbulence, 3 (2002).
- [160] Y. SATO, *Turbulence Structure and Modeling of dispersed Two-Phase Flows*, Dissertation, Keio University, 1996.
- [161] R. SCHMEHL, *Theory and Application of single component Evaporation Models*, Bericht, Institut für Thermische Strömungsmaschinen, Universität Karlsruhe, Karlsruhe, 1998.
- [162] R. SCHMEHL, H. ROSSKAMP, M. WILLMANN UND S. WITTIG, *CFD Analysis of Spray Propagation and Evaporation including Wall Film Formation and Spray/Film Interactions*, in: ILASS'98 Europe, Manchester, 1998, S. 546–555.

- [163] H.-J. SCHMID, *Zum Partikeltransport in elektrischen Abscheidern*, Dissertation, Universität Karlsruhe, Shaker Verlag, Aachen, 1999.
- [164] L. SCHMITT, *Numerische Simulation turbulenter Grenzschichten (Large Eddy Simulation) Teil 1*, Bericht 82/2, Lehrstuhl für Strömungsmechanik, Technische Universität München, 1982.
- [165] U. SCHUMANN, *Ein Verfahren zur direkten numerischen Simulation turbulenter Strömungen in Platten- und Ringspaltkanälen und über seine Anwendung zur Untersuchung von Turbulenzmodellen*, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1973.
- [166] ———, *Subgrid Length-Scales for Large Eddy Simulation of stratified Turbulence*, Theoret. Comput. Fluid Dynamics, 2 (1991), S. 279–290.
- [167] U. SCHUMANN UND R. A. SWEET, *A direct Method for the Solution of Poisson's Equation with Neumann Boundary Conditions on a Staggered Grid of Arbitrary Size*, Journal of Computational Physics, 20 (1976), S. 171–182.
- [168] J. S. SHUEN, C.-D. CHEN UND G. M. FAETH, *Evaluation of a stochastic Model for Particle Dispersion in a turbulent Round Jet*, AIChE J., 29 (1983), S. 167–170.
- [169] J. S. SHUEN, A. S. P. SOLOMON, Q.-F. ZANG UND G. M. FAETH, *Structure of Particle-laden Jets: Measurements and Predictions*, AIAA J., 23 (1985), S. 396–404.
- [170] O. SIMONIN, E. DEUTSCH UND M. BOIVIN, *Large Eddy Simulation and Second-Moment Closure Model of Particle fluctuating Motion in Two-Phase turbulent Shear Flows*, in: 9th Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow, Bd. 9, 1995, S. 85–115.
- [171] O. SIMONIN, Q. WANG UND K. D. SQUIRES, *Comparison between Two-Fluid Model Predictions and Large Eddy Simulation Results in a vertical Gas-Solid Turbulent Channel Flow*, ASME-FED, Fluids Engineering Division Summer Meeting, (1997), S. 1–9.
- [172] W. A. SIRIGNANO, *Fluid Dynamics of Sprays - 1992 Freeman Scholar Lecture*, J. Fluids Engineering, 115 (1993), S. 345–378.
- [173] J. S. SMAGORINSKY, *General Circulation Experiments with the primitive Equations, 1. The basic Experiment*, Monthly Weather Rev., 91 (1963), S. 99–164.
- [174] P. J. SMITH, T. J. FLETCHER UND L. D. SMOOT, *Model for pulverized coal-fired Reactors*, 18th Int. Symp. on Combustion, (1981), S. 1285–1293.
- [175] W. H. SNYDER UND J. L. LUMLEY, *Some Measurements of Particle Autocorrelation Functions in a turbulent Flow*, J. Fluid Mech., 48 (1971), S. 41–71.

- [176] A. SOHANKAR, L. DAVIDSON UND C. NORBERG, *A Dynamic One-Equation Subgrid Model for Simulation of Flow around a Square Cylinder*, Engineering Turbulence Modelling and Experiments, 4 (1999), S. 227–236.
- [177] M. SOLTANI UND G. AHMADI, *Direct Numerical Simulation of Particle Entrainment in turbulent Channel Flow*, Phys. Fluids, 7 (1995), S. 647–657.
- [178] M. SOMMERFELD, *Modelling of Particle-wall Collisions in confined Gas-Particle Flows*, Int. J. Multiphase Flow, 18 (1992), S. 905 ff.
- [179] ———, *Modellierung und numerische Berechnung von Partikel-beladenen turbulenten Strömungen mit Hilfe des Euler-Lagrange Verfahrens*, Habilitation, Shaker Verlag, Aachen, Universität Erlangen/Nürnberg, 1996.
- [180] M. SOMMERFELD, G. KOHNEN UND M. RÜGER, *Some open Questions and Inconsistencies of Lagrangian Particle Dispersion Models*, 9th Sympoñ Turbulent Shear Flows, (1993), S. 15.1.1–15.1.6.
- [181] M. SOMMERFELD UND H. H. QIU, *Detailed Measurements in a swirling particulate Two-Phase Flow by a Phase-Doppler-Anemometer*, Int. J. Heat and Fluid Flow, 12 (1991), S. 20–28.
- [182] ———, Hrsg., *Experimental Studies on Spray Evaporation in a turbulent Flow*, Erlangen, Deutschland, 1994. Proceedings of the 7th Workshop on Two Phase Flow Predictions.
- [183] S. L. SOO, *Fluid Dynamics of Multiphase Systems*, Watham, MA: Baisdell, (1967), S. 524 ff.
- [184] ———, *Multiphase Fluid Dynamics*, Science Press, Beijing, Gower Technical, Brookfield, (1990).
- [185] D. B. SPALDING, Hrsg., *The Combustion of liquid Fuels*, 1953. Proc. Fourth. Symp. (Int.) on Combustion.
- [186] E. M. SPARROW UND J. L. GREGG, *The variable Fluid-property Problem in free Convection*, Trans. Am. Soc. Mech. Engrs., 80 (1958), S. 879–886.
- [187] J. H. SPURK, *Strömungslehre: Einführung in die Theorie der Strömungen*, Springer-Verlag, Berlin – Heidelberg – New York, 1987.
- [188] K. D. SQUIRES UND J. K. EATON, *Particle Response and Turbulence Modification in isotropic Turbulence*, Phys. of Fluids A, 2 (1990), S. 1191–1203.
- [189] ———, *Measurements of Particle Dispersion obtained from Direct Numerical Simulations of isotropic Turbulence*, J. Fluid Mech., 226 (1991), S. 1–35.

- [190] ———, *Preferential Concentration of Particles by Turbulence*, Phys. of Fluids A, 3 (1991), S. 1169 ff.
- [191] ———, *Effect of selective Modification of Turbulence on Two-Equation Models for Particle-laden turbulent Flows*, Trans. ASME J. Fluids Engineering, 116 (1994), S. 778–784.
- [192] Z. STOJANOVIC, *Investigation of turbulent dilute non-reacting Gas-Solid Two-Phase Flows*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 2003.
- [193] S. SUNDARAM UND L. COLLINS, *Numerical Considerations in Simulating a turbulent Suspension of Finite Volume Particles*, J. Comp. Phys., 124 (1996), S. 337–350.
- [194] ———, *Collision Statistics in an isotropic Particle-laden turbulent Suspension. Part 1.: Direct Numerical Simulations*, J. Fluid Mech., 335 (1997), S. 75–109.
- [195] ———, *A numerical Study of the Modulation of isotropic Turbulence by suspended Particles*, J. Fluid Mech., 379 (1998), S. 105–143.
- [196] S. TAKIGUCHI, T. KAJISHIMA UND Y. MIYAKE, *Numerical Scheme to resolve the Interaction between solid Particles and Fluid Turbulence*, JSME Int. Journal, 42 (1999), S. 411–418.
- [197] G. I. TAYLOR, *Diffusion by continuous Movements*, Proc. London Math. Soc. Series, 20 (1921), S. 196–211.
- [198] C. M. TCHEN, *Mean Value and Correlation Problems connected with the Motion of Small Particles suspended in a Turbulent Fluid*, Dissertation, University of Technology, Delft, Netherlands, 1947.
- [199] A. Y. TONG UND W. A. SIRIGNANO, *Analysis of vaporizing Droplet with Slip, internal Circulation and unsteady Liquid Phase Heat Transfer*, in: JSME-ASME Thermal Engng. Joint Conference, Honolulu, Hawaii, 1983.
- [200] G. C. TRUESDELL UND S. ELGHOBASHI, *On the Two-Way Interaction between homogeneous Turbulence and dispersed solid Particles II: Particle Dispersion*, Phys. of Fluids A, 6 (1994), S. 1405–1411.
- [201] W. S. J. UIJTTEWAAL UND R. V. A. OLIEMANS, *Particle Dispersion and Deposition in Direct Numerical and Large Eddy Simulation of vertical Pipe Flows*, Phys. of Fluids, 3 (1996), S. 2590–2604.
- [202] F. UNGER, *Numerische Simulation turbulenter Rohrströmungen*, Dissertation, Lehrstuhl für Fluidmechanik, Technische Universität München, 1993.

- [203] E. R. VAN DRIEST, *On turbulent Flow near a Wall*, J. Aeronaut. Sci., 23 (1956), S. 1007–1011.
- [204] B. VAN HAARLEM, B. B. J. UND F. T. M. NIEUWSTADT, *Direct Numerical Simulation of Particle Deposition onto a Free-Slip and No-Slip Surface*, Phys. Fluids, 10 (1998), S. 2608–2620.
- [205] M. W. VANCE UND K. D. SQUIRES, *An Approach to parallel Computing in an Eulerian-Lagrangian Two-Phase Flow Model*, Fluids Engineering Division Summer Meeting, ASME FED, 31225 (2002), S. 1–9.
- [206] VDI-GESELLSCHAFT, Hrsg., *VDI-Wärmeatlas*, VDI-Verlag, 8. Aufl., 1997.
- [207] R. VERZICCO, O. P. UND D. HAWORTH, *Large Eddy Simulation in complex geometric Configurations using Boundary Body Forces*, AIAA Journal, 38 (2000), S. 427–433.
- [208] A. VINCENT UND M. MENEGUZZI, *The spatial Structure and statistical Properties of homogeneous Turbulence*, J. Fluid Mech., (1991), S. 1–20.
- [209] L. P. WANG UND M. R. MAXEY, *Settling Velocity and Concentration Distribution of heavy Particles in homogeneous isotropic Turbulence*, J. Fluid Mech., (1993), S. 27 ff.
- [210] Q. WANG UND K. D. SQUIRES, *Large Eddy Simulation of Particle-laden turbulent Channel Flow*, Phys. Fluids, 8 (1996), S. 1207–1223.
- [211] Q. WANG, K. D. SQUIRES UND O. SIMONIN, *Large Eddy Simulation of turbulent Gas-solid Flows in a vertical Channel and Evaluation of Second-Order Models*, in: 8th Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow, Bd. 3, 1997, S. 18–23.
- [212] Q. WANG, K. D. SQUIRES UND X. WU, *Lagrangian Statistics in turbulent Channel Flow*, Atmos. Env., 29 (1995), S. 2417–2427.
- [213] C. WEINBERGER, *Large-Eddy-Simulation von reagierenden und nicht-reagierenden turbulenten ebenen Freistrahlen*, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt, 1997.
- [214] M. R. WELLS UND D. E. STOCK, *The Effects of crossing Trajectories on the Dispersion of Particles in a turbulent Flow*, J. Fluid Mech., 136 (1983), S. 31–62.
- [215] J. WILLIAMSON, *Low-Storage Runge-Kutta Schemes*, J. Comp. Phys., 35 (1980), S. 48–56.
- [216] Y. YAMAMOTO, M. POTTHOFF, T. TANAKA, T. KAJISHIMA UND Y. TSUJI, *Large Eddy Simulation of turbulent Gas-Particle Flow in a vertical Channel: Effect of considering inter-particle Collisions*, J. Fluid Mech., 442 (2001), S. 303–334.

- [217] C. Y. YANG UND U. LEI, *The Role of the turbulent Scales in the settling Velocity of heavy Particles in homogeneous isotropic Turbulence*, J. Fluid Mech., 371 (1998), S. 179–205.
- [218] L. P. YARIN UND G. HETSRONI, *Turbulent Intensity in dilute Two-Phase Flows*, Int. J. Multiphase Flow, 20 (1994), S. 27–44.
- [219] F. YEH UND U. LEI, *On the Motion of small Particles in a homogeneous isotropic turbulent Flow*, Phys. Fluids A, 3 (1991), S. 2571–2586.
- [220] P. K. YEUNG UND S. B. POPE, *An Algorithm for tracking Fluid Particles in numerical Simulations of homogenous Turbulence*, J. Comp. Physics, 79 (1988), S. 373–416.
- [221] A. YOSHIKAWA, *A statistically-derived Subgrid-Scale Kinetic Energy Model for Large Eddy Simulation of Turbulence*, Phys. Fluids, 25 (1982), S. 1532–1537.
- [222] A. YOSHIKAWA UND K. HORIUTI, *A statistically-derived Subgrid-Scale Kinetic Energy Model for Large Eddy Simulation of turbulent Flow*, J. Phys. Soc. Jpn., 54 (1985), S. 2834–2839.
- [223] Z. YUAN UND E. E. MICHAELIDES, *Turbulence Modulation in particulate Flows*, Int. J. Multiphase Flow, 18 (1992), S. 779–785.
- [224] S. YUU, *Effects of Particles Existences on Low and High Reynolds Number Gas-Particle Jets*, ISAC'97, High Performance Computing on Multiphase Flows, (1997), S. 67–73.
- [225] S. YUU, N. I. YASUKOUCHI, Y. HIROSAWA UND T. JOTAKI, *Particle turbulent Diffusion in a Duct-laden Jet*, AIChE J., 24 (1978), S. 509–519.